

UNIVERSIDADE NOVA DE LISBOA

Faculdade de Ciências e Tecnologia

Departamento de Química

Biocombustível a partir de celulose –
Hidrogenação de isómeros da Hidroximetilpiranona

Por

Andreia Filipa dos Santos Cordeiro

Dissertação apresentada na Faculdade de Ciências e
Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa para obtenção do
grau de Mestre em Engenharia Química e Bioquímica.

Orientador: Prof. Doutor Pedro Brito Correia

Lisboa

2009

Agradecimentos

Os agradecimentos são o reconhecimento do apoio prestado de quem nos é próximo, por isso a sua referência neste trabalho é para mim uma obrigação.

Em primeiro lugar quero agradecer à minha família, especialmente aos meus pais por todo o apoio recebido para a elaboração deste trabalho.

Ao Professor Doutor Pedro Brito Correia pela enorme sabedoria, motivação, disponibilidade e apoio prestados ao longo deste trabalho.

Ao Professor Doutor João Paulo Noronha pelo inestimável conselho em matéria de GC-MS e química em geral.

Ao meu namorado Filipe Robert, pelo precioso apoio prestado e pela enorme compreensão.

À Filipa Santos pelo companheirismo na parte laboratorial.

À Sr.^a D. Maria José Carapinha, pela simpatia, paciência e atenção sempre dispensadas.

A todos vós,

Muito Obrigado!

Índice

Agradecimentos	I
Índice	II
Índice de figuras	IV
Índice de tabelas	VII
Resumo	IX
Abstract	X
1. Introdução	1
2. Química do processo.....	3
2.1. Química da reacção de hidrogenação dos isómeros de 2-Hidroximetil- piranona.....	3
2.2. Líquidos iónicos.....	6
2.3. Escolha do catalisador	9
3. Procedimento experimental dos ensaios preliminares	10
4. Resultados	13
4.1. Resultados de ensaios preliminares das hidrogenações	13
4.2. Resultados do ensaio final	26
4.3. Identificação do Metilpirano por GC-MS	27
5. Materiais e métodos do ensaio final (19 de Fevereiro de 2009).....	29
5.1. Descrição experimental.....	29
6. Balanços energéticos do Metil pirano	32
6.1. Entalpias	33
6.2. Consumo de energia nas etapas antes da hidrogenação	34
6.3. Consumo de energia na hidrogenação	36
6.4. Consumo de energia na sua produção	37

6.5. Comparação entre a entalpia de combustão e o consumo de energia na sua produção.....	38
7. Biocombustíveis líquidos de origem vegetal	39
7.1. Economia energética dos biocombustíveis	39
7.1.1. Biodiesel	39
7.1.2. Bioetanol	40
7.1.3. Metilpirano	41
8. Conclusão e trabalho futuro	42
9. Anexos	44
9.1. Espectros GCMS.....	44
9.2. Fichas de segurança.....	61
10. Referências Bibliográficas	115

Índice de figuras

Figura 2.1: Esquema da reacção de desidratação da glucose em HMP.....	3
Figura 2.2: Esquema da reacção de hidrogenação de isómeros de HMP em isómeros de Metilpirano e Metiltetrahidropirano	4
Figura 2.3: Esquema da reacção de hidrogenação de isómeros de HMP em isómeros de Metil tetrahidropirano	4
Figura 2.4: Esquema global das reacções envolvidas desde a desidratação da celulose à formação do Metil pirano	5
Figura 4.1: Furfural.....	16
Figura 4.2: Álcool furfurílico.....	16
Figura 4.3: 2-Hidroximetilpiranona.....	16
Figura 4.4: Reacção de polimerização do Álcool furfurílico.....	24
Figura 4.5: FTIR da resina furfurílica encontrada na literatura.....	24
Figura 4.6: Espectro do ^{13}C NMR (150 MHz) do Álcool polifurfurílico.....	25
Figura 5.1: Imagem da reacção de Hidrólise da celulose em líquido iónico.....	29
Figura 6.1: Reacção de formação do Cloreto de <i>N</i> -Metilimidazole	33
Figura 6.2: Esquema da reacção de hidrólise da celulose em glucose	33
Figura 6.3: Esquema da reacção de desidratação da glucose em HMP	34
Figura 6.4: Esquema da reacção de hidrogenação da HMP em Metilpirano	34
Figura 9.1: Traçado de corrente iónica total do destilado, resíduo e possível produto..	44
Figura 9.2: Espectros de massa de impacto electrónico do possível produto	45
Figura 9.3: Traçado de corrente iónica do tempo de retenção 13,427 minutos	46
Figura 9.4: Espectro de massa de impacto electrónico do tempo de retenção 13,427 minutos.....	47

Figura 9.5: Espectro de massa de impacto electrónico do tempo de retenção 18,504 minutos do resíduo	48
Figura 9.6: Traçado de corrente iónica dos tempos de retenção do dia 4 de Novembro	49
Figura 9.7: Espectro de massa de impacto electrónico do tempo de retenção 11,669 minutos	50
Figura 9.8: Espectro de massa de impacto electrónico do tempo de retenção 10,970 minutos - Éter dibutílico	51
Figura 9.9: Traçado de corrente iónica dos tempos de retenção do dia 18 de Novembro	52
Figura 9.10: Traçado de corrente iónica dos tempos de retenção do dia 27 de Janeiro..	53
Figura 9.11: Espectro de massa de impacto electrónico do tempo de retenção 8.376 minutos	54
Figura 9.12: Espectro de massa de impacto electrónico do tempo de retenção 9.093 minutos	55
Figura 9.13: Traçado de corrente iónica dos tempos de retenção da amostra depois da hidrogenação.....	56
Figura 9.14: Traçado de corrente iónica dos tempos de retenção depois da Hidrogenação	56
Figura 9.15: Espectro de massa do pico $t_r=8.11$ minutos	57
Figura 9.16: Espectro de massa do pico $t_r=12.05$ minutos	57
Figura 9.17: Espectro de massa do pico $t_r=21.10$ minutos	57
Figura 9.18: Espectro de massa do pico $t_r=25.80$ minutos (ftalato).....	57
Figura 9.19: Espectro de massa do pico $t_r=32.78$ minutos	58
Figura 9.20: Traçado de corrente iónica dos tempos de retenção antes da hidrogenação	58

Figura 9.21: Espectro de massa do pico $t_r=10.53$ minutos	58
Figura 9.22: Espectro de massa do pico $t_r=12.08$ minutos	59
Figura 9.23: Espectro de massa do pico $t_r=17.87$ minutos	59
Figura 9.24: Espectro de massa do pico $t_r=19.30$ minutos	59
Figura 9.25: Espectro de massa do pico $t_r=21.24$ minutos	59
Figura 9.26: Espectro de massa do pico $t_r=25.15$ minutos	60
Figura 9.27: Espectro de massa do pico $t_r=32.32$ minutos	60
Figura 9.28: Espectro de massa do pico $t_r=32.81$ minutos	60

Índice de tabelas

Tabela 1.1: Potencial bioenergético anual da biomassa.....	1
Tabela 4.1: Hidrogenação dos isómeros de HMP no líquido iónico Cloreto de <i>N</i> -metilimidazole.....	14
Tabela 4.2: Hidrogenação dos isómeros de HMP no líquido iónico Sulfato de <i>N</i> -metilimidazole.....	15
Tabela 4.3: Hidrogenação dos isómeros de HMP no líquido iónico Fosfato de <i>N</i> -metilimidazole.....	15
Tabela 4.4: Valores em gramas dos componentes da extracção com CMI, Éter dibutílico e Furfural.....	17
Tabela 4.5: Determinação do coeficiente de partição do Furfural.....	18
Tabela 4.6: Valores em gramas dos componentes da extracção com CMI, Éter isopropílico e Álcool furfurílico.....	18
Tabela 4.7: Determinação do coeficiente de partição do Álcool furfurílico.....	19
Tabela 4.8: Valores em gramas dos componentes da extracção com CMI, Éter isopropílico e Álcool furfurílico	19
Tabela 4.9: Determinação do coeficiente de partição do Álcool furfurílico	22
Tabela 4.10: Hidrogenação em Éter dibutílico dos isómeros de HMP obtidos previamente usando no líquido iónico Cloreto de <i>N</i> -metilpirrolidina.....	22
Tabela 4.11: Hidrogenação em Éter dietílico dos isómeros de HMP obtidos previamente usando no líquido iónico Cloreto de <i>N</i> -metilpirrolidina	23
Tabela 4.12: Hidrogenação em Éter isopropílico dos isómeros de HMP obtidos no líquido iónico Cloreto de <i>N</i> -Metilimidazole.....	23
Tabela 4.13: Hidrogenação em Éter dietílico dos isómeros de HMP obtidos previamente no líquido iónico Cloreto de <i>N</i> -Metilimidazole	26
Tabela 4.14: Valores dos tempos de retenção e respectivas massas moleculares das amostras da hidrogenação do dia 23 de Outubro.....	27

Tabela 4.15: Valores dos tempos de retenção e respectivas massas moleculares das amostras da hidrogenação do dia 4 de Novembro.....	27
Tabela 4.16: Valores dos tempos de retenção e respectivas massas moleculares das amostras da hidrogenação do dia 18 de Novembro de 2008.....	27
Tabela 4.17: Valores dos tempos de retenção e respectivas massas moleculares das amostras da hidrogenação do dia 27 de Janeiro de 2009	28
Tabela 4.18: Valores dos tempos de retenção e respectivas massas moleculares das amostras antes e depois da hidrogenação do dia 19 de Fevereiro 2009	27
Tabela 5.1: Parâmetros e condições usados na experiência	30
Tabela 6.1: Dados da entalpia de formação e massa molecular	32
Tabela 7.1: Balanço de energia do Biodiesel a partir de Girassol e Soja	38
Tabela 7.2: Balanço de energia do Bioetanol	39
Tabela 7.3: Valores de unidades de energia produzida por cada unidade de energia consumida para cada biocombustível.....	40

Resumo

O principal objectivo deste trabalho foi investigar as condições experimentais para a produção de um novo biocombustível a partir da celulose.

Este biocombustível é constituído por isómeros do Metilpirano que foram obtidos através da hidrogenação de isómeros de Hidroximetilpiranona (HMP). A sua produção consiste primeiro na dissolução da celulose num líquido iónico. De seguida a celulose é hidrolisada em glucose e esta é desidratada em isómeros de Hidroximetilpiranona. Para a reacção de hidrogenação os isómeros de HMP são extraídos do líquido iónico com éter e depois hidrogenados num reactor Parr.

Os diferentes aspectos estudados foram: a escolha do líquido iónico para dissolver e desidratar a celulose em glucose, que passou pelo Cloreto de *N*-metilimidazole, Sulfato de *N*-metilimidazole, Fosfato de *N*-metilimidazole e o Cloreto de *N*-metilpirrolidina; a escolha do catalisador, que não fosse desactivado pelo líquido iónico que foram o Paládio sobre carvão, o Paládio sobre Alumina e o Cromito de Cobre; o solvente para a extracção dos isómeros da HMP que foram os Éteres dibutílico, isopropílico e etílico; o consumo de Hidrogénio; a temperatura da reacção e o tempo de reacção.

Para o estudo do comportamento químico da HMP foram usados como referências os compostos: Álcool Furfurílico e Furfural.

As condições experimentais óptimas para a produção de isómeros do Metilpirano foram: o líquido iónico seleccionado foi o Cloreto de *N*-metilimidazole, o catalisador foi o Paládio sobre Alumina, o solvente foi o Éter etílico, a temperatura foi de 90°C, o tempo de reacção foi de duas horas e a pressão foi 30 bar.

A identificação do Metilpirano foi feita por análise do GC-MS, cujo fragmento maior foi de $m/Z = 96$ uma.

Foi também estudado o aspecto energético do Metilpirano e comparado com outros biocombustíveis e verificou-se que para o Metilpirano a proporção de energia gasta/produzida era de 1:8,63, para o Biodiesel 1:4,75 e para o Bioetanol 1:1,5.

Abstract

The main objective of this study was to investigate the experimental conditions to produce a new biofuel from cellulose. This biofuel is made of methyl pyran isomers which were obtained by hydrogenation of isomers of hydroxymethylpiranone (HMP). Its production starts with the dissolution of cellulose in an ionic liquid. Then the cellulose is hydrolyzed into glucose and this is dried in isomers of hydroxymethylpiranone. For the hydrogenation reaction the isomers of HMP are extracted from the ionic liquid with ether and then hydrogenated in a Parr reactor.

The different aspects studied were: the choice of ionic liquid to dissolve and dehydrated the cellulose into glucose, which passed the *N*-methylimidazole Chloride, *N*-methylimidazole Sulphate, *N*-methylimidazole Phosphate and *N*-methylpyrrolidine Chloride; the choice of the catalyst, which would not be disabled by the ionic liquid that was the Palladium on coal, Palladium on Alumina and Copper chromite; the solvent for the extraction of HMP isomers that were dibutyl, ethyl and isopropyl ethers; the consumption of hydrogen; the reaction temperature and time of reaction.

To study the chemical behavior of HMP the compounds used as reference, were: furfural and furfuryl alcohol.

The optimal experimental conditions for the production of isomers of methylpyrane were: the selected ionic liquid was the *N*-methylimidazole chloride, the catalyst was the Palladium on Alumina, the solvent was ethyl ether, the temperature was 90 ° C, time of reaction was two hours and pressure was 30 bar.

The identification of methylpyrane was done by the GC-MS analysis, with largest fragment was $m / Z = 96$ *uma*. It was also studied the energy appearance of methylpyrane and compared with other biofuels, and it was found that the methylpyrane proportion of energy used / produced was 1:8.63, for Biodiesel 1:4.75 and for Bioethanol 1:1.5.

1. Introdução

A diminuição das reservas de combustíveis fósseis e o aumento do aquecimento global indicam que são necessários, num futuro próximo, recursos energéticos sustentáveis. Uma das alternativas ao petróleo é a biomassa, tendo aumentado o número de investigações em torno da conversão desta em biocombustíveis líquidos.

Actualmente existe um interesse crescente por fontes alternativas de energia, principalmente por aquelas que contribuam na redução das emissões de CO₂. O balanço global do sistema consumo/produção do CO₂ nos biocombustíveis é nulo porque estes produzem CO₂ que foi antes adsorvido pelas plantas.

Para isso, o uso de biocombustíveis líquidos, como o Bioetanol e o Biodiesel são vistos como alternativas viáveis. Contudo, pouca atenção vem sendo dada aos estudos do balanço energético, que estabelece a relação entre o total de energia contida no biocombustível e o total de energia fóssil investida em todo o processo de produção do biocombustível.

A estimativa da biomassa existente também é um problema energético, devido à variedade de usos finais de energia provenientes dessa biomassa, das cadeias de abastecimento e dos concorrentes que usam esses recursos da biomassa como alimentos.

A biomassa apresenta fortes características como sendo o recurso mais sustentável e renovável como fonte de energia.

O potencial bioenergético anual é cerca 7×10^{10} TEP (toneladas equivalente de petróleo), subdividido nas seguintes categorias, (Hall e Rao, 1999).

Tabela 1.1: Potencial bioenergético anual da biomassa.

Potencial bioenergético anual	Subdividido em
7×10^{10} TEP	$4,1 \times 10^{10}$ TEP de florestas
	2×10^{10} TEP de pastagens
	$0,84 \times 10^{10}$ de áreas agrícolas

Em teoria, a energia proveniente da agricultura pode contribuir cerca de 8×10^{20} J, sem afectar a alimentação mundial (Faaij et al, 2002), visto que a agricultura não produz só alimentos.

Os resíduos agrícolas tornam-se assim no centro da bioenergia e têm um enorme potencial para serem o ponto de partida para futuros biocombustíveis.

Actualmente tem havido muitos estudos sobre a produção de biocombustíveis líquidos a partir da celulose, mas nenhum estudo referiu a produção de isómeros de Metilpirano usando líquidos iónicos, através da seguinte sequência de operações: dissolução e hidrólise de celulose, desidratação da glucose, extracção e hidrogenação da Hidroximetilpiranona em isómeros de Metilpirano.

O recurso aos líquidos iónicos é particularmente importante, pois são o único solvente da celulose que também permite a hidrólise em glucose e a desidratação desta^[2].

Tem havido estudos individuais sobre os vários passos da produção, nomeadamente a dissolução da celulose em líquidos iónicos ^[2,14,26], hidrólise da celulose em glucose ^[4,16], desidratação da frutose em isómeros de Hidroximetilfurfural^[8,13,17,21,31] e extracção destes isómeros do líquido iónico através do solvente apropriado^[33].

O objectivo deste estudo consiste na hidrogenação dos isómeros da 2-Hidroximetilpiranona em Metilpirano, escolhendo as condições experimentais que permitam a hidrogenação que passam pela escolha do catalisador, do solvente, da temperatura, da pressão, do tempo e das proporções dos componentes da mistura reaccional.

O presente estudo também visa mostrar o potencial energético do biocombustível Metilpirano e sua comparação com outros biocombustíveis líquidos de origem vegetal nomeadamente o Bioetanol e o Biodiesel.

2. Química do processo

2.1. Química da reacção de hidrogenação de isómeros de 2-Hidroximetilpiranona

A síntese de isómeros de HMP provém da hidrólise da celulose em glucose e desidratação desta em isómeros de HMP. A dissolução da celulose ocorre em líquido iónico, Cloreto 1-Metilimidazole (CMI) contendo uma pequena quantidade de ácido clorídrico a 37%, necessária para que ocorra a hidrólise da celulose em glucose. A reacção de desidratação ocorre numa segunda fase da reacção. A glucose é assim desidratada em isómeros de HMP e três moléculas de água, como mostra a Figura 2.1. A síntese de isómeros de HMP é baseada na tripla desidratação da glucopiranona em meio ácido. O HMP é um composto instável e com elevado ponto de ebulição, logo não pode ser usado como combustível. Para ultrapassar esta limitação, a solução passa por hidrogenar os isómeros de HMP originando isómeros de Metilpirano, que é um composto cíclico derivado da piranona, com fórmula molecular C_6H_8O (Figura 2.2). A hidrogenação vai quebrar o grupo carbonilo ($C=O$) e o grupo hidroxilo (OH) da HMP formando o Metilpirano ou então também pode hidrogenar as duplas ligações formando o Metiltetrahidropirano (Figura 2.3). Assim, os seis átomos de carbono da glucose são convertidos em seis átomos de carbono de Metilpirano de forma a otimizar os aspectos energéticos.

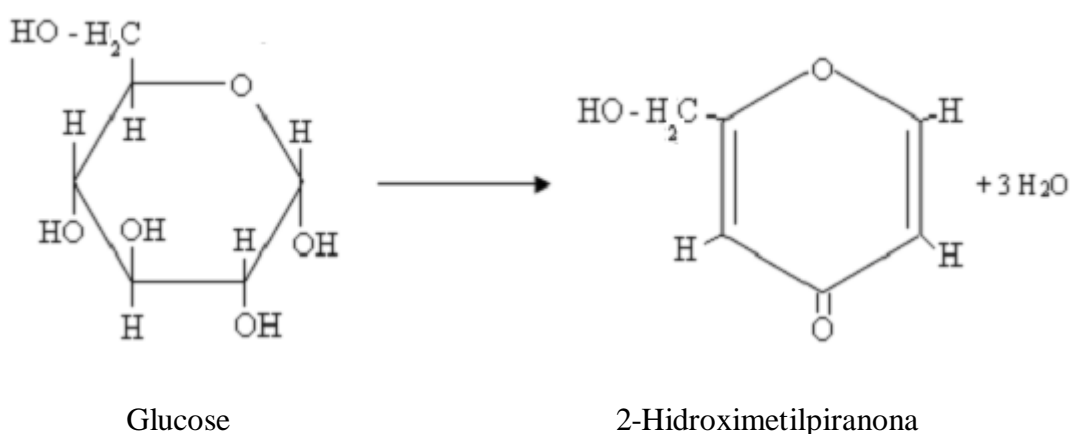


Figura 2.1: Esquema da reacção de desidratação da glucose em HMP.

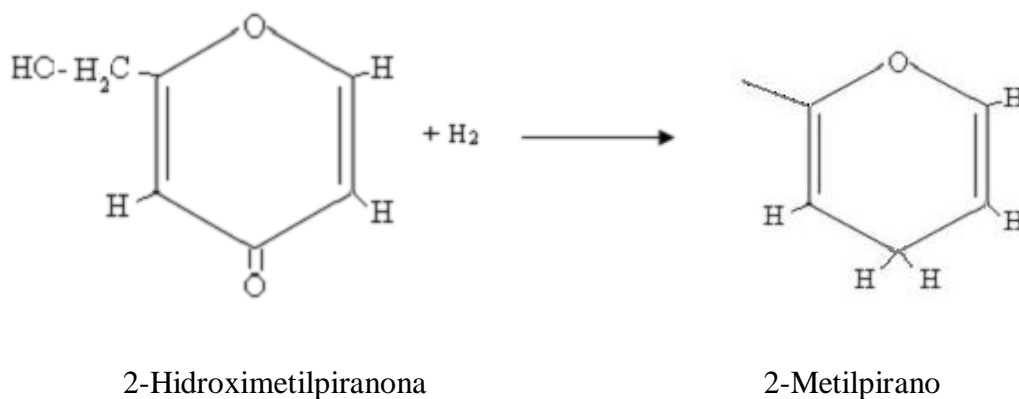


Figura 2.2: Esquema da reacção de hidrogenação de isómeros de HMP em isómeros de Metilpirano e Metiltetrahidropirano.

Outro possível produto da hidrogenação é o 2-Metiltetrahidropirano:

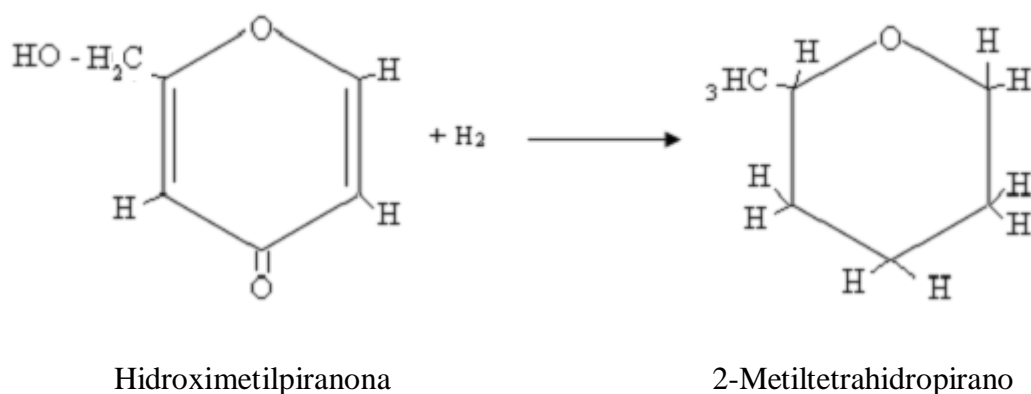


Figura 2.3: Esquema da reacção de hidrogenação de isómeros de HMP em isómeros de 2-Metiltetrahidropirano.

A 2-Hidroximetilpiranona contém menos três moléculas de água do que a glucopirranose, por isso não é possível eliminar mais água senão por desidratação intermolecular que conduz à carbonização.

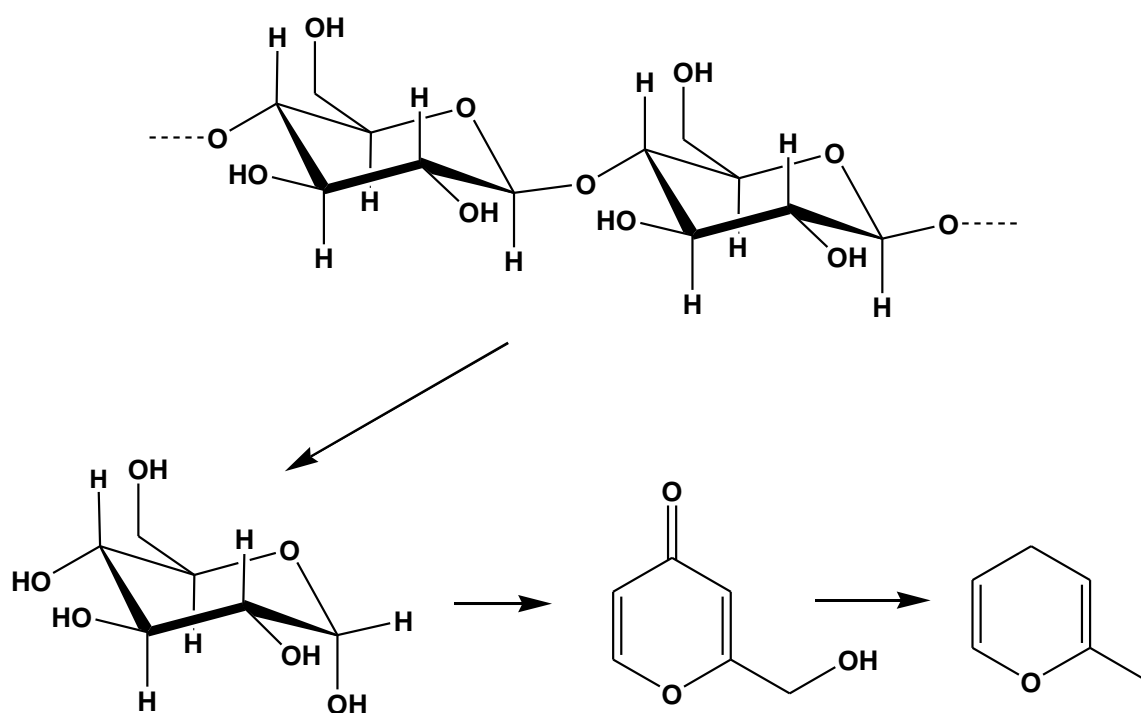


Figura 2.4: Esquema global das reacções envolvidas desde a desidratação da celulose à formação do 2-Metilpirano.

2.2. Líquidos iónicos

Os líquidos iónicos são uma classe de solventes compostos unicamente por iões. Contrariamente aos solventes “comuns”, as moléculas em solução podem exhibir propriedades distintas daquelas que se verificam noutros solventes.

Têm em geral um elevado conteúdo iónico, uma elevada condutividade iónica, uma viscosidade baixa, não são voláteis, são resistentes à chama, entre outras propriedades.

Propriedades e Características Gerais dos Líquidos Iónicos

Os líquidos iónicos apresentam pontos de ebulição e de fusão elevados que se explicam pela presença de fortes interacções iónicas, interacções essas que se devem ao facto de serem substâncias compostas por iões.

Os líquidos iónicos contendo catiões do tipo *imidazole* são os mais bem estudados, por possuírem diversas propriedades favoráveis, sendo uma delas a facilidade de síntese, baixa viscosidade e boa estabilidade electroquímica. As propriedades deste tipo de líquido iónico são fortemente influenciadas pela natureza quer do catião, quer do anião. A natureza das cadeias laterais presentes no anel imidazólico conduz a interacções hidrofóbicas ou hidrofílicas que afectam a solubilidade do líquido iónico em solventes mais ou menos polares. Por outro lado, os protões do anel imidazólico são capazes de formar pontes de hidrogénio.

Em geral, os líquidos iónicos revelam-se bons solventes para moléculas orgânicas contendo grupos polares tais como álcoois, aminas, compostos carbonílicos e também para diversos sais metálicos que sejam solúveis noutros solventes polares.

Volatilidade e Estabilidade

Os líquidos iónicos não têm pressão-vapor mensurável, o que os torna solventes atractivos, uma vez que:

- Não há perdas de solvente (ao contrário dos solventes orgânicos convencionais) pois os produtos da reacção podem ser facilmente destilados mesmo em vácuo;
- Na preparação, o solvente e o catalisador podem ser reutilizados.

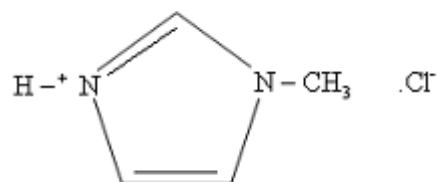
Com o aumento da temperatura surge o problema da termo-estabilidade do catião. Há líquidos iónicos estáveis até aos 400°C, o que leva a que seja possível usá-los numa vasta gama de temperaturas e/ou em vácuo sem que haja perdas de solvente ou emissão de vapores.

Comportamento ácido-base

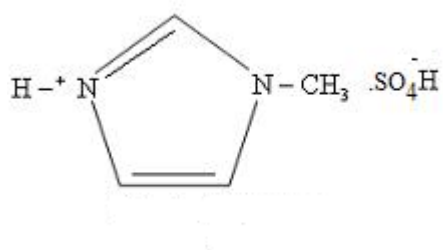
Os líquidos iônicos podem ter comportamentos muito distintos quanto à sua acidez/basicidade. O comportamento ácido-base de um líquido iônico é principalmente determinado pelo anião.

De seguida apresenta-se a estrutura dos líquidos iônicos usados nas experiências.

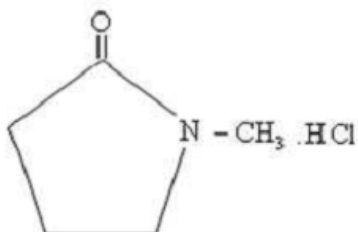
- Cloreto de *N*-metilimidazole



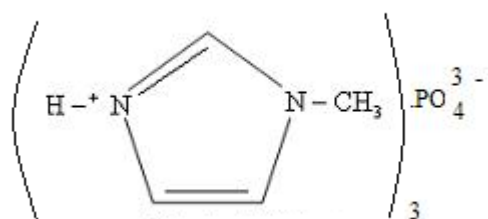
- Sulfato de *N*-metilimidazole



- Cloreto de *N*-metilpirrolidina



- Fosfato de *N*-metilimidazole



2.3. Escolha do catalisador

Nos sectores da energia e dos transportes, a catálise é essencial na produção de combustíveis e no controlo da poluição, e por conseguinte os processos catalíticos permitem minimizar a produção de resíduos no fabrico de produtos químicos. Os catalisadores são essenciais para aumentar a velocidade da reacção e para orientar o processo na formação do produto pretendido. Por isso a escolha de um bom catalisador neste processo de hidrogenação é importante e tem de satisfazer as condições experimentais. Como o reagente é líquido teve-se de se usar um catalisador microparticulado (75-200 μm de diâmetro) para se manter em suspensão no líquido.

Segundo a tabela de “Classificação de catalisadores heterogéneos” ^[3] para reacções de hidrogenação utiliza-se a classe dos metais, dentro os quais o Paládio e que os metais de transição são bons catalisadores para reacções que envolvem hidrogénio e hidrocarbonetos, e isto explica-se pela capacidade de os metais adsorverem dissociativamente estas substâncias.

Neste estudo foram testados três catalisadores diferentes:

- Paládio (5% em peso) sobre carvão;
- Paládio (5% em peso) sobre Alumina;
- Cromito de cobre ($\text{Cu}_2\text{Cr}_2\text{O}_5$).

3. Procedimento experimental dos ensaios

Procedeu-se a quatro métodos de hidrogenação para os isómeros de Hidroximetilpiranona:

A) Hidrogenar os isómeros de HMP no líquido iónico:

Os líquidos iónicos usados foram o Cloreto de *N*-metilimidazole, o Fosfato de *N*-metilimidazole e o Sulfato de *N*-metilimidazole.

B) Hidrogenar os isómeros de HMP no Éter diisopropílico:

Extraíram-se os isómeros de HMP com éter isopropílico, do líquido iónico (Cloreto de *N*-metilimidazole) e hidrogenou-se no próprio éter.

C) Hidrogenar os isómeros de HMP no Éter etílico:

Extraíu-se os isómeros de HMP com Éter dietílico dos líquidos iónicos (Cloreto de *N*-metilimidazole e Cloreto de *N*-metilpirrolidina) e hidrogenou-se no próprio éter.

D) Hidrogenar os isómeros de HMP no Éter dibutílico:

Extraíu-se os isómeros de HMP com Éter dibutílico do líquido iónico Cloreto de *N*-metilpirrolidina.

Procedimento experimental para hidrogenações no líquido iónico:

- Inertiza-se o catalisador dentro do reactor, 5 vezes com azoto a 4 bar;
- Prepara-se o líquido iónico, adicionando lentamente o ácido (Sulfúrico, Clorídrico ou Fosfórico) ao Metilimidazole ou Metilpirrolidina. No caso do Ácido Clorídrico elimina-se a água do sistema no rotavapor;
- No reactor parr coloca-se a celulose e o líquido iónico preparado previamente;
- Inertiza-se 5 vezes com azoto a 4 bar;
- Introduce-se hidrogénio a 30 bar e verifica-se se o reactor se mantém estável e se não tem fugas;
- Aquece-se o reactor em banho de silicone a 100°C durante 2 horas e repõe-se a pressão de hidrogénio sempre que reduz para 20 bar.
- Ao fim de 2 horas, quando a pressão parar de baixar para 20 bar desliga-se o banho e deixa-se o reactor arrefecer;
- Retira-se a mistura para um copo, adicionasse água e filtra-se com vácuo;
- À solução filtrada faz-se 6 extracções com éter;
- Injecta-se uma amostra do extracto.

Procedimento experimental para hidrogenações no éter:

- Prepara-se o líquido iónico, adicionando lentamente o ácido (Sulfúrico, Clorídrico ou Fosfórico) ao Metilimidazol ou Metilpirrolidina;
- Coloca-se num balão de 250 ml a celulose e o líquido iónico e aquece-se durante 1 hora a 80°C;
- Quando a mistura começar a ficar acastanhada efectuar 6 extracções com éter;
- Destilar o éter de forma a reduzir o volume;
- Introduzir o extracto de éter no reactor Parr;
- Inertiza-se o catalisador dentro do reactor, 5 vezes com azoto a 4 bar;
- O éter com os isómeros da Hidroximetilpiranona é colocado até meio do reactor Parr;
- Inertiza-se 5 vezes com azoto a 4 bar;
- Liga-se o reactor ao hidrogénio à pressão de 30 bar.
- Cola-se o reactor em banho de silicone a 100°C durante 1 hora e ligado ao hidrogénio;
- Ao fim de 1 hora desliga-se o banho e deixa-se o reactor arrefecer;
- A solução hidrogenada é destilada no rotavapor para ser submetida a análise.

4. Resultados e discussão

4.1. Resultados de Ensaios preliminares

Após a reacção de hidrólise da celulose e desidratação da glucose precedeu-se à hidrogenação dos isómeros da Hidroximetilpiranona. Para tal realizou-se vários ensaios diferentes. Realizou-se primeiro a hidrogenação no líquido iónico, ou seja no reactor Parr ocorriam as seguintes reacções por ordem: Hidrólise da celulose, Desidratação da glucose em isómeros de HMP e por fim a Hidrogenação de isómeros de HMP em isómeros de Metilpirano. O outro método utilizado foi extrair os isómeros de HMP do líquido iónico com éter e hidrogenar no próprio éter.

- **Hidrogenações no líquido iónico:**

O primeiro líquido iónico usado foi o Cloreto de *N*-metilimidazole porque na literatura é actualmente descrito como o que dissolve melhor a celulose ^[2,14]. No entanto a tabela 4.1 mostra que não houve consumo de hidrogénio. A temperatura escolhida para a reacção foi de 100°C para que a celulose não carbonizasse antes de ser convertida em glucose. Os isómeros de HMP dissolvidos no líquido iónico não reagiram com o hidrogénio porque os iões cloreto desactivam o catalisador de Paládio ou Cromito de cobre. No entanto existem artigos e patentes que descrevem hidrogenações em líquidos iónicos contendo *N*-metilimidazole com os aniões sulfato a 60 – 90°C sem hidrogenar as duplas ligações do imidazol^[2]. Por isso optou-se por hidrogenar em Sulfato de *N*-metilimidazole, cujos resultados se encontram na tabela 4.2.

Para que a hidrogenação tenha lugar, é necessário que a temperatura de hidrogenação seja inferior à temperatura de carbonização da glucose. Esta temperatura depende da proporção de ácido sulfúrico para *N*-metilimidazole. No entanto estas hidrogenações não foram bem sucedidas porque a mistura reaccional era muito viscosa e dificultou a dissolução do hidrogénio.

Na tabela 4.2, na experiência do dia 27 de Janeiro de 2009 houve consumo de Hidrogénio (3 cargas) mas a análise do espectro do GC-MS revelou que para o tempo de retenção de 8,376 minutos o espectro de massa corresponde ao ião molecular, dado que tem o pico maior e com $m/Z = 95/96$ uma, ou seja isómeros do Metilpirano. O outro pico do tempo de retenção 9,093 minutos corresponde a fragmentos da mesma molécula de $m/Z = 43$ uma e $m/z = 71$ uma. Como não temos padrões desta molécula não podemos comparar com o espectro obtido.

A mudança de Sulfato de *N*-metilimidazole para Fosfato de *N*-metilimidazole foi devido ao não consumo de Hidrogénio e o ião Sulfato poderia desactivar o catalisador. No entanto a hidrogenação no líquido iónico Fosfato de *N*-metilimidazole foi sem sucesso, como se pode verificar na tabela 4.3.

O catalisador de Paládio sobre carvão foi substituído pelo Paládio sobre Alumina dado que o carvão tem uma percentagem de água que pode dificultar a adsorção dos reagentes.

Dada a viscosidade da mistura reaccional optou-se então por extrair os isómeros de Hidroximetilpiranona da mistura de celulose mais líquido iónico e só depois hidrogenar.

Essa extracção foi feita com éter e a sua escolha baseou-se no seu ponto de ebulição que tem de ser bastante diferente do Metilpirano, para depois o éter ser destilado e reaproveitado.

Tabela 4.1: Hidrogenação dos isómeros de HMP no líquido iónico Cloreto de *N*-metilimidazole.

Exp.	Quantida de CNMI (g)	Quantidade celulose (g)	Catalisador Pd/carvão (g)	Solvente após hidrogenação (ml)	Temperatu ra do reactor (°C)	Tempo da reacção (min ⁻¹)	Consumo de Hidrogénio
Dez	274,5	10	2	Éter isopropílico	100	60	Não consumiu
Dez	372	15	3	Éter isopropílico	100	60	Não consumiu

Tabela 4.2: Hidrogenação dos isómeros de HMP no líquido iónico Sulfato de *N*-metilimidazole.

Exp.	Quantidade SNMI (g)	Quantidade celulose (g)	Catalisador Pd/carvão (g)	Solvente após hidrogenação (ml)	Temperatura do reator (°C)	Tempo da reacção (min ⁻¹)	Consumo de Hidrogénio
5 Jan	274,5	10	2	Éter isopropílico	80	60	Não consumiu
27-Jan	372	15	3	Éter isopropílico	90	120	3 X
28 Jan	372	8	3	Éter isopropílico	90	120	Não consumiu
30 Jan	292	15	3	Éter etílico	90	120	Não consumiu
4 Fev	287	10	3	Éter etílico	100	120	Não consumiu

Tabela 4.3: Hidrogenação dos isómeros de HMP no líquido iónico Fosfato de *N*-metilimidazole.

Exp.	Quantidade SNMI (g)	Quantidade celulose (g)	Catalisador (g)	Solvente após hidrogenação (ml)	Temperatura do reator (°C)	Tempo da reacção (min ⁻¹)	Consumo de Hidrogénio
5 Fev.	256	10	3 Pd/Al	Éter isopropílico	90	120	Não consumiu

- **Ensaio com Furfural e Álcool furfurílico (considerados semelhantes à Hidroximetilpiranona)**

Antes de iniciar as hidrogenações no éter, realizaram-se ensaios com o Furfural e o Álcool furfurílico, dado que estes compostos são semelhantes à HMP no seu comportamento químico.

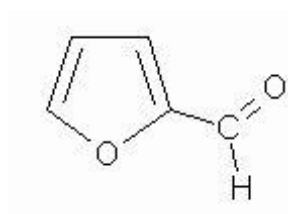


Figura 4.1: Furfural

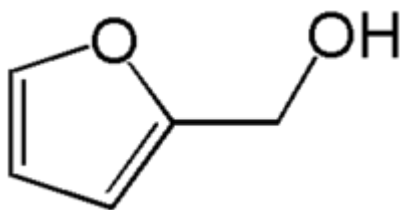


Figura 4.2: Álcool furfurílico

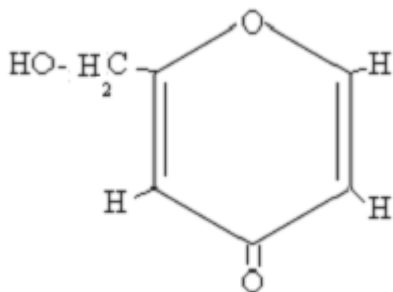


Figura 4.3: 2-Hidroximetilpiranona

Os 3 compostos são éteres cíclicos, no entanto o Furfural tem um grupo carbonilo (C=O) e o Álcool furfurílico tem o grupo hidroxilo (OH), o que nos permite saber qual o grupo que reage na 2-Hidroximetilpiranona.

1º Ensaio:

O primeiro ensaio consistiu em aquecer a 100°C Éter dibutílico, Cloreto de *N*-metilimidazole e Furfural e ao fim de quatro horas formam-se duas fases, uma amarelo claro e transparente e outra escura e opaca, contendo o líquido iónico. Ao fim de dois dias forma-se uma fase única em ambos os casos.

Aquecendo Furfural em Éter dibutílico a 140°C forma-se uma solução amarela transparente e uns sólidos pretos. Os sólidos pretos, polímeros de Furfural, são insolúveis em Éter dibutílico.

A adição de metanol ao líquido iónico não impede a polimerização.

A polimerização do Furfural por perda de água entre moléculas não é inibida pela hidroquinona, nem por aminas terciárias.

Repetiu-se a experiência com Álcool furfurílico e obteve-se resultados idênticos.

A desidratação intermolecular evita-se reduzindo a temperatura da reacção.

2º Ensaio:

Realizou-se um ensaio para determinar o coeficiente de partição do Furfural entre o Éter dibutílico e no Cloreto de *N*-metilimidazole:

- Misturou-se numa ampola de decantação 40 g de CMI (com 5% de ácido clorídrico 37%), com 40 g de Éter dibutílico e decantou-se. Após separação e pesagem das fases obteve-se 40 g de Éter dibutílico e 40g de CMI.

Tabela 4.4: Valores em gramas dos componentes da extracção com CMI, Éter dibutílico e Furfural.

CMI	40 g
Éter dibutílico	40 g
Furfural	40 g
Total	120 g

Agitou-se e separou-se as fases numa ampola de decantação.

Tabela 4.5: Determinação do coeficiente de partição do Furfural.

Fase iónica	48,4 g
Fase éter dibutílico	72,1 g
Total	120,5 g
Furfural na fase iónica	$48,4 - 40 = 8,4$
Furfural na fase éter	$72,1 - 40 = 32,1$

- O coeficiente de partição é 4 no éter para 1 no CMI, ou seja é um bom solvente dos isómeros da Hidroximetilpiranona.

Verificou-se com o Furfural, como composto semelhante à Hidroximetilpiranona, que a adição de 10 – 20% de água ao líquido iónico antes da extracção aumentava o coeficiente de partição favoravelmente para o éter.

3º Ensaio:

Efectuaram-se dois tipos de extracções para determinar o coeficiente de partição do Álcool furfurílico. Na primeira extracção misturou-se Cloreto de *N*-metilimidazole com Éter isopropílico. Na segunda extracção misturou-se Cloreto de *N*-metilimidazole, Éter isopropílico e água para verificar se a água no sistema favorecia a partição.

- Extracção 1 (Cloreto de *N*-metilimidazole + Éter isopropílico + Álcool furfurílico)

Tabela 4.6: Valores em gramas dos componentes da extracção com CMI, Éter isopropílico e Álcool furfurílico.

CMI	25,5 g
Éter isopropílico	29,4 g
Álcool furfurílico	29,1 g
Total	84 g

Agitou-se e separou-se as fases numa ampola de decantação.

Tabela 4.7: Determinação do coeficiente de partição do Álcool furfurílico.

Fase iónica	50,9 g
Fase éter isopropílico	31,3 g
Total	82,2 g
Álcool furfurílico na fase iónica	$50,9 - 25,5 = 25,4$
Álcool furfurílico na fase éter	$31,3 - 29,4 = 1,9$

O coeficiente de partição é por isso $25,4/1,9 = 13$ na fase iónica, para 1 na fase éter.

Considerando que o Furfural tem este coeficiente de partição, e considerando que a glucose sem 3 moléculas de água (piranonas) deve ter um coeficiente de partição semelhante, então, quando o Éter isopropílico não extrai suficiente quantidade de produtos da desidratação da glucose, a explicação deve ser que a glucose perdeu mais ou menos do que 3 moléculas de água.

Conclusão: o controle da perda de água da glucose é crucial para o processo.

- Extracção 2 (Cloreto de *N*-metilimidazole + Éter isopropílico + Álcool furfurílico + Água)

Tabela 4.8: Valores em gramas dos componentes da extracção com CMI, Éter isopropílico, Álcool furfurílico e Água.

CMI	25,5 g
Éter isopropílico	29,4 g
Álcool furfurílico	29,1 g
Água	30,6
Total	114,6 g

Agitou-se e separou-se as fases numa ampola de decantação.

Tabela 4.9: Determinação do coeficiente de partição do Álcool furfurílico.

Fase iónica	70,8 g
Fase éter isopropílico	41,3
Total	82,2 g
Álcool furfurílico na fase iónica	$70,8 - 25,5 - 30,6 = 20,7 \text{ g}$
Álcool furfurílico na fase éter	$41,3 - 29,1 = 11,2 \text{ g}$

Admitiu-se que o éter não se mistura com o líquido iónico e que a água não se mistura com o éter. O coeficiente de partição é por isso $20,7 / 11,2 = 1,8$ na fase iónica, para 1 na fase éter. Considerando que o Álcool furfurílico, tal como o Furfural, é semelhante aos produtos da desidratação da glucose, conclui-se que para além do controle da água perdida pela glucose é importante adicionar água ao líquido iónico antes de fazer a extracção com éter. De facto verificamos que o éter fica mais amarelado se adicionarmos, antes da extracção, cerca de 30% de água ao líquido iónico contendo produtos da desidratação da glucose.

Ao adicionar água ao líquido iónico este torna-se mais iónico e menos alifático, o que corresponde a um *salting out effect*, ou seja o líquido iónico ficou mais iónico para a HMP e isso facilitou a sua passagem para o éter.

O Furfural tem coeficiente de partição mais favorável na fase éter em relação à fase CMI+ água do que o Álcool furfurílico.

Dada a presença dum carbonilo na HMP é previsível que a HMP também tenha um coeficiente de partição semelhante ao do Furfural.

- **Ensaaios com outros solventes:**

Para a extracção também foram testados os seguintes solventes:

- Metanol, Etanol, Isopropanol e Butanol: os álcoois ficam excluídos porque se misturam com o líquido iónico e impedem a extracção.
- Hexano e o Tolueno: não dissolvem o Furfural, que foi usado como referência por ser semelhante no seu comportamento químico à Hidroximetil piranona, cuja obtenção da Adrich, Merck ou Fluka não foi possível.
- Tetrahidrofurano: é miscível com o líquido iónico.
- Acetato de etilo: hidrolisa em contacto com o líquido iónico, mas não é miscível.
- Éter dietílico, Éter isopropílico e Éter dibutílico: o Éter dibutílico foi inicialmente o solvente escolhido por ter uma temperatura de ebulição (142°C), superior à temperatura de hidrólise da celulose, para que o solvente não evapore antes da hidrólise.

- **Hidrogenações no éter:**

A separação da Hidroximetilpiranona do líquido iónico com éter tem de ser efectuada para evitar a polimerização. Por outro lado, o extracto de éter antes da hidrogenação não pode ser levado a uma grande concentração de Hidroximetilpiranona, por que esta facilmente polimeriza.

A separação por destilação da Hidroximetilpiranona não é possível, dado o seu elevado ponto de ebulição de cerca de 200°C. Esta é a temperatura de decomposição do líquido iónico. Uma destilação em vácuo conduz a uma desidratação com oligomerização.

No entanto na tabela 4.10, hidrogenações com éter dibutílico, verifica-se que não houve consumo de hidrogénio. A temperatura escolhida foi de 230°C porque foi a temperatura referida nos artigos de hidrogenação de compostos idênticos como o Hidroximetilfurfural (HMF) ^[23].

Pela análise da experiência do dia 23 de Outubro verifica-se que no espectro de traçado electrónico dos tempos de retenção, o pico do tempo de retenção 13,427 minutos (Figura 9.1 e 9.3 do capítulo 9 – Anexos) correspondente ao espectro de massa de impacto electrónico do ião molecular de $m/Z = 85$ *uma* (Figura 9.4) mostra que não existe um produto de 96g/mol que seria isómeros do Metilpirano. Os espectros da figura 9.2 mostram possíveis isómeros de um composto de $m/Z = 85$ *uma*. A figura 9.5 mostra um espectro de massa de um ião molecular de $m/Z = 57$ *uma*, que corresponde ao éter dibutílico.

A experiência do dia 4 de Novembro foi sem sucesso pois não houve consumo de Hidrogénio. O espectro dos tempos de retenção da figura 9.6 mostra um pico de tempo de retenção maior nos 11,669 minutos que corresponde ao espectro de massa (Figura 9.7) com um ião molecular de $m/Z = 99$ *uma*. Estes produtos que não isómeros do Metilpirano correspondem a produtos da desidratação da Glucose. O espectro de massa do pico de tempo de retenção 10,970 minutos corresponde ao Éter dibutílico (Figura 9.8). Este catalisador, o Cromito de Cobre revelou não ser eficaz.

Como os resultados destas duas experiências foram sem sucesso optou-se por experimentar o Éter etílico e o Éter isopropílico.

Tabela 4.10: Hidrogenação em Éter dibutílico dos isómeros de HMP obtidos previamente usando como líquido iónico Cloreto de *N*-metilpirrolidina.

Exp.	Quantidade CNMP (g)	Quantidade celulose (g)	Catalisador (g)	Temperatura do reator (°C)	Tempo da reacção (min ⁻¹)	Consumo de Hidrogénio
23 Out.	87,5	7	1,5 Pd/carvão	230	120	Não consumiu
4 Nov.	87,5	7	1,5 Cromito de Cobre	230	120	Não consumiu

Na tabela 4.11 pode-se verificar que não houve consumo de Hidrogénio, ou seja neste caso o líquido iónico usado foi o Cloreto de *N*-metilpirrolidina que se concluiu não ser um bom solvente da celulose.

Tabela 4.11: Hidrogenação em Éter dietílico dos isómeros de HMP obtidos previamente usando no líquido iónico Cloreto de *N*-metilpirrolidina.

Exp.	Quantidade CNMP (g)	Quantidade celulose (g)	Catalisador (g)	Temperatura do reator (°C)	Tempo da reacção (min ⁻¹)	Consumo de Hidrogénio
6 Nov.	87,5	7	1,5 Pd/carvão	230	120	Não consumiu

Na tabela 4.12 verificou-se que houve consumo de Hidrogénio em todas as experiências mas não significou que houve formação de isómeros do Metilpirano. O espectro do dia 18 de Novembro (Figura 9.9) mostra que no tempo de retenção de 25 minutos é provável que esteja o nosso produto. Estes resultados foram bem sucedidos mas no entanto o Éter isopropílico tem um ponto de ebulição baixo perto do ponto de ebulição do Metilpirano, cerca de 80°C, o que torna impossível a separação depois da hidrogenação. Por isso optou-se por usar o Éter dietílico e os resultados encontram-se no ensaio final (Capítulo 4.2).

Tabela 4.12: Hidrogenação em éter isopropílico dos isómeros de HMP obtidos no líquido iónico Cloreto de *N*-Metilimidazole.

Exp.	Quantidade CNMI (g)	Quantidade celulose (g)	Catalisador (g)	Temperatura do reactor (°C)	Tempo da reacção (min ⁻¹)	Consumo de Hidrogénio
6 Fev.	86	10	2 Pd/Al	140	120	1 X
18 Nov. Espectro	65	10	1,5 Pd/carvão	140	120	1 X
25 Nov.	65	6,5	1,5 Pd/carvão	140	120	1 X
12 Nov.	67	14	1,5 Pd/carvão	140	120	1 X

• Polimerização dos isómeros de HMP

Os isómeros de HMP que se formam polimerizam muito facilmente dando uma cor escura (castanho escuro) à solução reaccional.

A 130°C tanto o Furfural como o Álcool furfurílico misturados com CMI polimerizam ao fim de 15 minutos.

Se a polimerização fosse nas duplas ligações não se formava a cor escura. Se a polimerização fosse no grupo aldeído do Furfural o Álcool furfurílico não polimerizava.

A cor escura e posterior carbonização forma-se por condensação entre moléculas, com perda de água.

A reacção de polimerização do Álcool furfurílico ^[38] serviu de previsão para a reacção de polimerização da Hidroximetilpiranona, ou seja a reacção dá-se pelo grupo hidroxilo.

Esta reacção de polimerização tem uma cor escura o que nos permite observar facilmente quando a reacção ocorre.

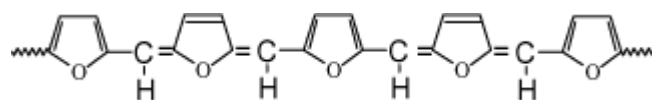


Figura 4.4: Reacção de polimerização do Álcool furfurílico (resina furfurílica).

A figura 4.5 mostra o FTIR da resina furfurílica que será idêntico ao polímero da HMP.

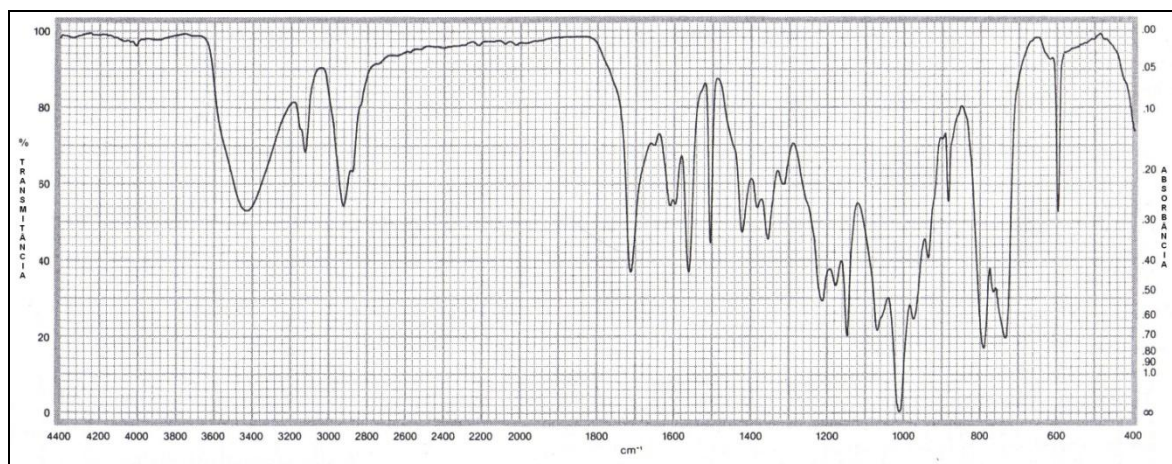


Figura 4.5: FTIR da resina furfurílica encontrada na literatura ^[37].

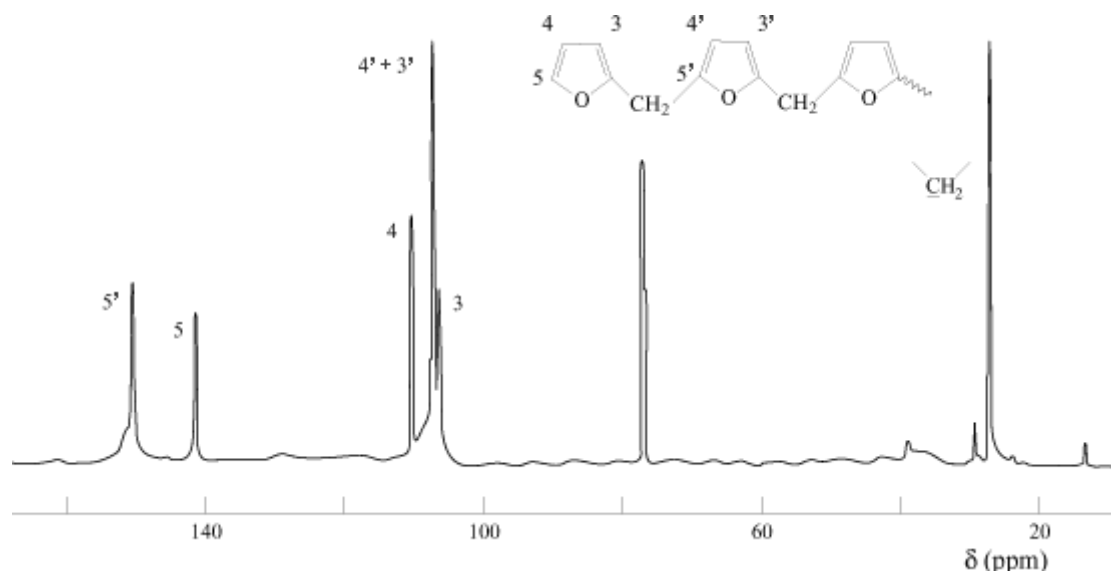


Figura 4.6: Espectro do ¹³C NMR (150 MHz) do Álcool polifurfurílico.

4.2. Resultados do ensaio final

A última experiência foi efectuada com as variáveis que melhor se ajustam às condições da reacção.

Essas variáveis são:

Solvente: Éter dietílico

Líquido iónico: Cloreto de *N*-metilimidazole

Catalisador: Paládio sobre Alumina

Este ensaio foi feito sem juntar água ao líquido iónico.

Tabela 4.13: Hidrogenação em Éter dietílico dos isómeros de HMP obtidos previamente no líquido iónico Cloreto de *N*-metilimidazole.

Exp.	Quantidade CNMI (g)	Quantidade de celulose (g)	Catalisador Pd/Al (g)	Temperatura do reactor (°C)	Tempo da reacção (min ⁻¹)	Consumo de Hidrogénio
19 Fev.	130	11	2	90	120	1X

- **Consumo de Hidrogénio**

O consumo de Hidrogénio para 11 g de celulose é 1 mole por mole de produto final. Para 0,068 moles de Metilpirano corresponde a 0,068 moles de Hidrogénio.

Admitindo que o reactor tem um volume livre de 150 ml, a 30 bar e 80°C existem no reactor 0,155 moles de Hidrogénio. A 20 bar e a 80°C existem 0,103 moles. Em cada recarga de 20 para 30 bar entram 0,052 moles de Hidrogénio. São precisas por isso 2 recargas de Hidrogénio para 11 g de celulose.

Neste último ensaio só houve uma recarga, ou seja não se obteve o rendimento total da reacção mas apenas uma parte dos isómeros da HMP foram hidrogenados.

Na hidrogenação da Hidroximetilpiranona a Metilpirano não são hidrogenadas duplas ligações.

4.3. Identificação do Metilpirano por GC-MS

As seguintes tabelas correspondem aos valores dos picos dos espectros do GC-MS das reacções de hidrogenação, que se encontram no capítulo 9.

Tabela 4.14: Valores dos tempos de retenção e respectiva massa/carga das amostras da hidrogenação do dia 23 de Outubro.

Tempo de retenção (min)	Massa/carga (m/Z)
13,427	85
18,504	57

Tabela 4.15: Valores dos tempos de retenção e respectiva massa/carga das amostras da hidrogenação do dia 4 de Novembro.

Tempo de retenção (min)	Massa/carga (m/Z)
10,970	57
11,669	99; 96;95

Tabela 4.16: Valores dos tempos de retenção e respectiva massa/carga das amostras da hidrogenação do dia 18 de Novembro.

Tempo de retenção (min)	Massa/carga (m/Z)
25	Não foi analisado

Tabela 4.17: Valores dos tempos de retenção e respectiva massa/carga das amostras da hidrogenação do dia 27 de Janeiro 2009.

Tempo de retenção (min)	Massa/carga (m/Z)
8.376	39 ; 95 ; 96
9.093	43 ; 71

Tabela 4.18: Valores dos tempos de retenção e respectiva massa/carga das amostras antes e depois da hidrogenação do dia 19 de Fevereiro 2009.

Depois da hidrogenação		Antes da hidrogenação	
Tempo de retenção (min)	Massa/carga (m/Z)	Tempo de retenção (min)	Massa/carga (m/Z)
8.11	95	10.53	42;71
12.05	43;57	12.08	43;57;71;85
21.20	57;205;220	17.87	41;107;135
25.80	149	19.30	41;57;63;83;112
32.78	41;55;70;149	21.24	205;220
-	-	25.15	41;57;81;126;155
-	-	32.32	43;57;71;81;113;126;155
-	-	32.81	43;57;70;149;167

5. Materiais e métodos do ensaio final (19 de Fevereiro de 2009)

5.1. Descrição experimental

O objectivo desta investigação é hidrogenar os isómeros de Hidroximetilpiranona em isómeros de Metilpirano. As hidrogenações são feitas num reactor Parr que permite altas pressões e altas temperaturas usando éter etílico como solvente. A Hidroximetilpiranona é obtida previamente após duas reacções que são a hidrólise da celulose e desidratação da glucose no líquido iónico.

O procedimento experimental destas duas reacções é o seguinte:

- **Reacção de Hidrólise e Desidratação no líquido iónico**

- Misturar num balão de 500 ml com agitador magnético e arrefecimento em banho de água 83 g de *N*-metilimidazole e gota a gota 130 g de Ácido Clorídrico 37 %;
- Vaporizar a água no rotavapor até deixar de pingar água no balão de recolha. O peso do líquido iónico final deve ser cerca de 130 – 140 g;
- Verificar o valor do pH misturando 1 g de líquido iónico com 10 g de água. O pH deve estar entre 0,9 e 1,1. Se estiver abaixo, vaporizar mais no rotavapor. Se estiver acima, adicionar Ácido Clorídrico 37%. O pH nas proporções estequiométricas é de 3.
- Transferir tudo para um balão de 500 ml e adicionar 5 g de celulose;
- Aquecer com banho de água a 70°C e com agitador mecânico de pás móveis;
- Acertar o pH e o peso total por adição de Ácido Clorídrico 37% ou água;
- Adicionar mais 2 g de celulose;
- Extrair com 5 porções de 100 ml de éter etílico e água com peso igual ao do líquido iónico (130-140 g);
- Evaporar à pressão atmosférica o extracto de éter no destilador com banho de água a 60°C e com condensador criogénico a cerca de 10°C, até restarem cerca de 50 – 60 ml de resíduo.

- **Reacção de hidrogenação**

- Carregar no reactor 2 g de catalisador Paládio sobre alumina mesoporosa e inertizar cinco vezes a 5 bar com Azoto;
- Carregar no reactor de 150 ml de volume o resíduo da destilação anterior;
- Ligar o reactor ao Azoto e inertizar 5 vezes a 5 bar;
- Hidrogenar a 30 bar de Hidrogénio em banho de silicone a 90°C. Repor a pressão de Hidrogénio a 30 bar sempre que descer para 20 bar. Ao fim de 2 horas, fechar a garrafa de Hidrogénio, arrefecer o reactor a 30°C e só depois despressurizar;
- Destilar numa coluna Vigreux e separar as fracções destiladas a 40°C, 70°C e 100°C;
- Fazer GC-MS do resíduo da destilação de cada fracção.



Figura 5.1: Imagem da reacção de Hidrólise da celulose em líquido iónico.

Tabela 5.1: Parâmetros e condições usados na experiência.

Parâmetro	Quantidade
<i>N</i> -Metilimidazole, g	83
Ácido Clorídrico, g	130
Celulose, g	11
Hidrogénio, bar	30
Azoto, bar	5
Temperatura da hidrogenação, °C	90
Volume do reactor, ml	150
Éter dietílico, ml	5×100
Catalisador Pd/Al, g	2
Tempo da reacção, h	2

6. Balanços energéticos do Metilpirano

Os cálculos energéticos apresentados de seguida vão permitir fazer um balanço de energia global à produção do Metilpirano.

Irão ser calculados os seguintes consumos de energia:

- Conversão da celulose em glucose (Hidrólise);
- Conversão de 1 mol de glucose em 1 mol de HMP (Desidratação);
- Conversão de 1 mol de HMP em 1 mol de Metilpirano (Hidrogenação).

Irá ser calculado a produção de energia de:

- 1 mol de Metilpirano.

6.1. Entalpias

Entalpias de formação

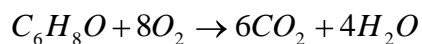
Tabela 6.1: Dados da entalpia de formação e massa molecular.

Substância	ΔH_f° (Kj/mol)	Massa Molecular (g/mol)
Ácido clorídrico	-92,3	36,5
Água	-285.84	18
Dióxido de carbono	-393.51	44
Celulose (monómero)	-1020	162
Éter dietílico	-271.2	84
Glucose	-1250	180
Hidrogénio	0	2
Hidroximetilpiranona	-30,8*	126
Metilpirano	-49,2*	96

*Valores aproximados de isómeros

Entalpia de combustão

A Entalpia de Combustão é a variação de entalpia na combustão de 1 mol de uma substância a 25 °C e 1 atm. A entalpia de combustão é sempre negativa pois, a combustão é uma reacção exotérmica. Para o cálculo da entalpia de combustão do Metilpirano determina-se primeiro as moléculas de oxigénio necessárias à combustão de 1 mol de Metil-pirano:



$$\Delta H_c = (4 \times (-285,5) + 6 \times (-393,5) - (-49,2))$$

$$\Delta H_c = -3453,8 \text{ kJ/mol}$$

6.2. Consumo de energia nas etapas antes da hidrogenação

1) Produção de líquido iónico (Cloreto de *N*-metilimidazole)

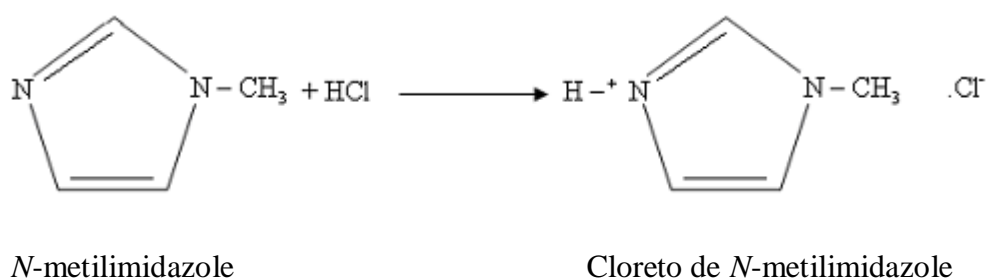


Figura 6.1: Reacção de formação do Cloreto de *N*-Metilimidazole.

Despreza-se a entalpia de formação do líquido iónico visto que é reciclado.

2) Hidrólise da celulose em β -glucose:

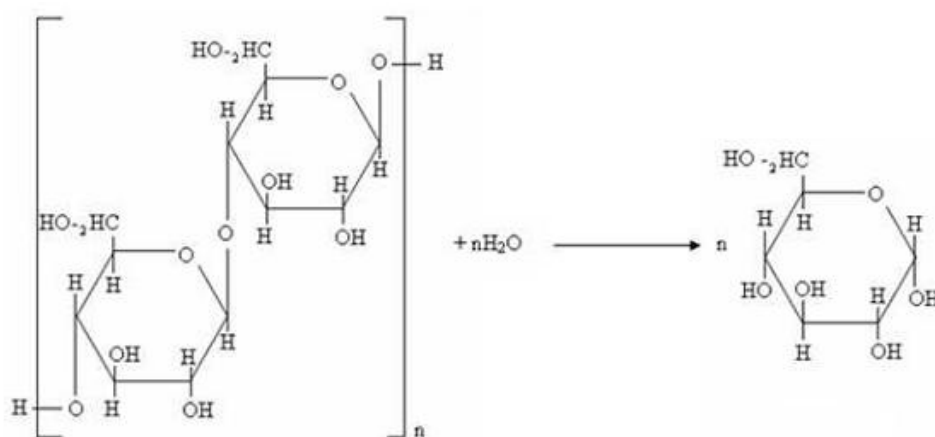


Figura 6.2: Esquema da reacção de hidrólise da celulose em glucose.

Dados:

- $m_{\text{celulose}} = 11\text{g}$
- 11 g de celulose $(\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5)_n = 0,068\text{ mol}$ de monómero de celulose
- 1 monómero de celulose forma 1 mol de glucose
- 0,068 mol de monómero de celulose forma 0,068 mol de glucose

$$\Delta H^\circ_R = \left(\sum_{i=1}^n n_i \times \Delta H^\circ_{f,i} \right)_{\text{produtos}} - \left(\sum_{i=1}^n n_i \times \Delta H^\circ_{f,i} \right)_{\text{reagentes}}$$

$$\Delta H^{\circ} = (n_{glucose} \times \Delta H^{\circ}_{f, glucose}) - (n_{celulose} \times \Delta H^{\circ}_{f, celulose} + n_{H_2O} \times \Delta H^{\circ}_{f, H_2O})$$

$$\Delta H^{\circ}_R = (0,068 \times (-1250)) - (0,068 \times (-1020) + 0,068 \times (-285,5))$$

$$\Delta H^{\circ}_R = 3,774 kJ/mol$$

3) Desidratação da glucose em 2-Hidroximetilpiranona:

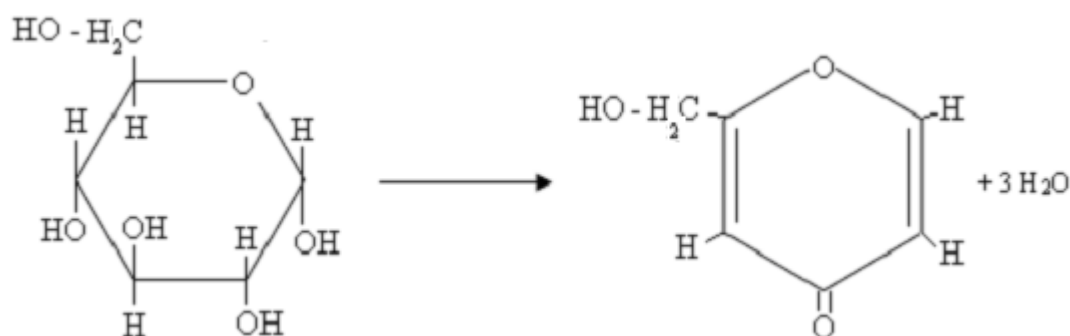


Figura 6.3: Esquema da reacção de desidratação da glucose em HMP.

Dados:

- 1 mol de glucose forma 1 mol de Hidroximetilpiranona
- 0,068 mol de glucose forma 0,068 mol de Hidroximetilpiranona

$$\Delta H^{\circ}_R = \left(\sum_{i=1}^n n_i \times \Delta H^{\circ}_{f,i} \right)_{produtos} - \left(\sum_{i=1}^n n_i \times \Delta H^{\circ}_{f,i} \right)_{reagentes}$$

$$\Delta H^{\circ} = (n_{HMP} \times \Delta H^{\circ}_{f, HMP} + n_{H_2O} \times \Delta H^{\circ}_{f, H_2O}) - (n_{glucose} \times \Delta H^{\circ}_{f, glucose})$$

$$\Delta H^{\circ} = (0,068 \times -30,8 + 0,204 \times (-285,5)) - (0,068 \times (-1250))$$

$$\Delta H^{\circ}_R = 24,66 kJ/mol$$

6.3. Consumo de energia na hidrogenação

A análise energética de uma reacção química está directamente relacionada com as energias de ligação entre os átomos das moléculas (de reagentes e produtos).

Para calcular o consumo de energia na Hidrogenação dos isómeros de Hidrometilpiranona em isómeros de Metilpirano temos de considerar os seguintes factores:

A) Energia gasta na conversão de 1 mol de HMP em 1 mol de Metilpirano;

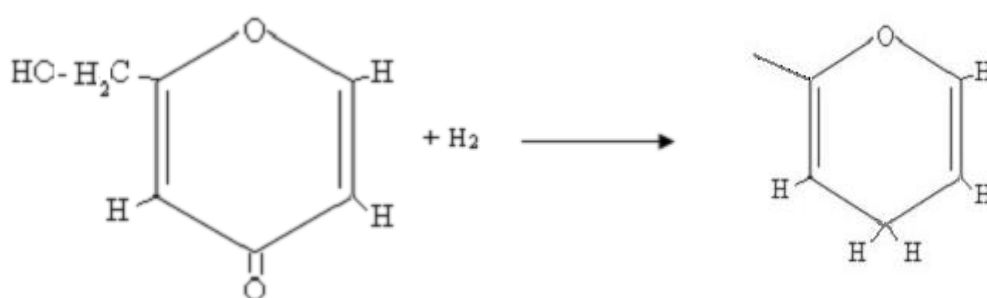


Figura 6.4: Esquema da reacção de hidrogenação da HMP em Metilpirano.

$$\Delta H^{\circ}_R = \left(\sum_{i=1}^n n_i \times \Delta H^{\circ}_{f,i} \right)_{\text{produtos}} - \left(\sum_{i=1}^n n_i \times \Delta H^{\circ}_{f,i} \right)_{\text{reagentes}}$$

$$\Delta H^{\circ} = (0,068 \times (-49,2) + 0,204 \times 0) - (0,068 \times (-30,8))$$

$$\Delta H^{\circ}_R = -1,25 \text{ kJ/mol}$$

6.4. Consumo de energia na sua produção

O consumo de energia total gasto na produção dos isómeros de Metilpirano é a soma da energia nas reacções de hidrólise da celulose e desidratação da glucose em isómeros de Hidroximetilpiranona e na hidrogenação.

A entalpia total é de 27,184 kJ/mol, ou seja a conversão global da celulose em Metil pirano requer uma quantidade significativa de energia.

6.5. Comparação entre a entalpia de combustão e o consumo de energia na sua produção

Comparando a entalpia de combustão (energia libertada durante a combustão de 1 mol de Metilpirano) e a energia gasta na produção de 1mol de Metilpirano, verifica-se o seguinte:

Existe um balanço positivo entre o consumo de energia de formação do Metilpirano e a produção de energia através da combustão.

Para 0,068 mol corresponde um gasto de energia de 27,184 kJ, para 1 mol corresponde a 400 kJ.

$$= -3453,8 \text{ kJ/mol} - 400 \text{ kJ/mol}$$

$$= -3053,8 \text{ kJ/mol}$$

7. Biocombustíveis líquidos de origem vegetal

7.1. Economia energética dos biocombustíveis

O balanço energético é o parâmetro mais adequado para definir a viabilidade técnica de um programa de bioenergia. Para ser positivo, o balanço energético depende de diversos factores.

7.1.1. Biodiesel

Tabela 7.1: Balanço de energia do Biodiesel a partir de Girassol e Soja.

Fatores	Girassol		Soja	
	Quantidade	kcal x 1000	Quantidade	kcal x 1000
Casca	Incluído na torta	Incluído na torta	desprezível	desprezível
Óleo	800 kg	7.200	720 kg	6.480
Torta	1.200 kg	4.800	3.280 kg	13.120
Total	2.000 kg	12.000	4.000 kg	19.600
Entradas	Agrícola	2855	Agrícola	2678
	Industrial	1610	Industrial	1449
Total	-	4.465	-	4.127
Balanço Óleo	800 kg	2735 (1: 1,61)	720 kg	2353 (1: 1,57)
Balanço Geral	-	7.535 (1: 2,69)	-	15.473 (1: 4,75)

Na tabela 7.1 verifica-se um balanço energético final positivo de 7.535.000 kcal/ha em girassol e 15.473.000 kcal/ ha para soja. Isto significa que, na cultura do girassol para cada unidade de energia que entra no sistema, produz-se 2,69 unidades de energia, sendo esta relação de 4,75:1 para a soja.

Segundo o autor *Sheehan et al.* (1998), relata um saldo negativo na conversão de soja em biodiesel, pois a obtenção de 10^6 J de biodiesel exige $1,24 \times 10^6$ J de energia fóssil.

7.1.2. Bioetanol

Vários estudos realizados envolvendo biocombustíveis, principalmente na Europa e Estados Unidos, apontam para balanços energéticos negativos. Pimentel & Patzek (2005) calcularam que são necessários aproximadamente 6597 kcal de energia fóssil para produzir um litro de etanol de milho nos Estados Unidos. Entretanto, um litro de etanol tem o valor energético de 5130 kcal, resultando em um balanço energético negativo de 1467 kcal. Não foi considerada nesse estudo a energia gasta no transporte para distribuição do etanol que, segundo DOE (2002), é estimada em 331kcal.

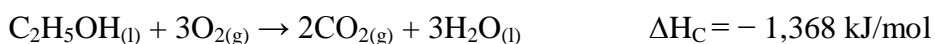
Tabela 7.2: Balanço de energia do Etanol.

Fator	Unidade	Quantidade	Energia (GJ)
Produção agrícola			13,47
Processamento Industrial ¹	MJ/litro	6,69	11,24
Energia consumida total			24,71
Etanol produzido (biocombustível)	litros/ton	120	37,46
Balanço energético:			1,52

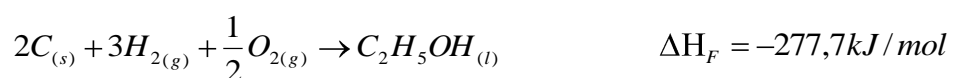
^{1/} Fonte: NGUYEN et al., 2007.

Na tabela 7.2 verifica-se que o balanço energético é positivo com a produção de $1,52 \times 10^9$ J de energia.

Entalpia combustão do etanol:



Entalpia formação do Etanol:



7.1.3. Metilpirano

O balanço energético do Metilpirano pode ser comparado na tabela seguinte que mostra que para cada unidade de energia necessária para produzir 1 mol de Metilpirano são necessárias 400 kJ de energia, ou seja produz a mais $3452,8/400 = 8,63$ kJ/mol de unidades de energia.

Tabela 7.3: Valores de unidades de energia produzida por cada unidade de energia consumida para cada biocombustível.

Metilpirano	Biodiesel	Bioetanol
8,63	4,75	1,51

8. Conclusão e trabalho futuro

Após um extenso trabalho laboratorial na pesquisa da produção de um novo biocombustível, pode-se concluir que se obteve resultados satisfatórios.

Esta investigação concluiu qual é melhor líquido iónico a usar na dissolução da celulose e sua hidrólise em glucose, para a produção de isómeros de Hidroximetilpiranona e posterior hidrogenação destes em isómeros de Metilpirano.

A hidrogenação no Éter dietílico foi a mais eficaz, apesar da dificuldade que a elevada tensão de vapor do éter provocou na verificação do Hidrogénio consumido no barómetro do reactor. As hidrogenações nos líquidos iónicos não foram eficazes, tanto o Sulfato de *N*-metilimidazole como o Cloreto de *N*-metilimidazole e o Fosfato de *N*-metilimidazole são líquidos iónicos muito viscosos, que dissolvem mal a celulose para posterior hidrogenação. A alta viscosidade também dificulta a hidrogenação pois a celulose não hidrolisa e porque o Hidrogénio não consegue dissolver-se na mistura reaccional. Teoricamente é possível baixar a viscosidade do líquido iónico juntando Metanol, por exemplo, mas a solubilidade da celulose baixa ainda mais.

Por outro lado a hidrogenação em Cloreto de *N*-metilimidazole não é possível, porque o Cloreto inibe os catalisadores de Paládio e Cromito de Cobre.

O catalisador Paládio sobre Alumina foi o seleccionado dado que o Paládio sobre carvão tem uma percentagem de água que pode dificultar a entrada dos reagentes e o Cromito de Cobre não funcionou na hidrogenação.

A formação de polímeros também impede a reacção.

Conclui-se em relação à temperatura da hidrogenação que esta tem de ser inferior a 100°C para a celulose não carbonizar.

A hidrogenação do Furfural, tomado como teste para hidrogenação em Sulfato de *N*-metilimidazole não funcionou, ou seja não houve consumo de hidrogénio. Pelo contrário o Furfural é hidrogenado em éter isopropílico a 40 – 50°C. Verificou-se por GC-MS que um dos produtos formados após hidrólise, desidratação e hidrogenação a partir da celulose são isómeros do Metilpirano (ensaio final).

Comparando os resultados do GC-MS do resíduo da destilação do extracto de Éter dietílico e do Éter isopropílico, obtém-se o mesmo pico. O Metilpirano tem um ponto de ebulição de 80°C, semelhante ao Éter isopropílico, pelo que o éter seleccionado como o melhor solvente foi o Éter dietílico.

Este pico tem tempo de retenção semelhante ao Furfural mas por FTIR verificou-se não ser Furfural por não conter carbonilo. Fez-se o FTIR do Furfural e do resíduo da destilação e eram diferentes.

O pico tem a mesma massa/carga que o Furfural (95 g/mol) e por isso é um isómero com ciclopirano, que só pode ser o Metilpirano.

Em relação ao estudo da energia verificou-se por estimativa que o Metilpirano tem um potencial energético muito superior ao biocombustíveis actuais, tendo um balanço positivo em relação ao seu consumo/produção de energia 8 vezes superior, comparando com o Biodiesel que tem 4 vezes superior e ao Bioetanol que só tem 1,5.

Por fim, embora este estudo não tenha sido totalmente conclusivo quanto à imediata utilização deste tipo de combustível, poderá servir de base para futuros trabalhos, graças às grandes descobertas e avanços laboratoriais conseguidos.

Para trabalho futuro pode-se referir um artigo^[39] recente que foi publicado em 21 de Janeiro de 2009 com o título “ *Simple Chemical Transformation of Lignocellulosic Biomass into Furans for Fuels and Chemicals*”, que descreve a produção de Hidroximetil- furfural a partir de celulose usando como solvente *N,N*-dimetilacetamida e Cloreto de Lítio, usando uma temperatura máxima de 140°C e com uma conversão de 92%.

9. Anexos

9.1. Espectros GC-MS

Espectro do dia 23 de Outubro

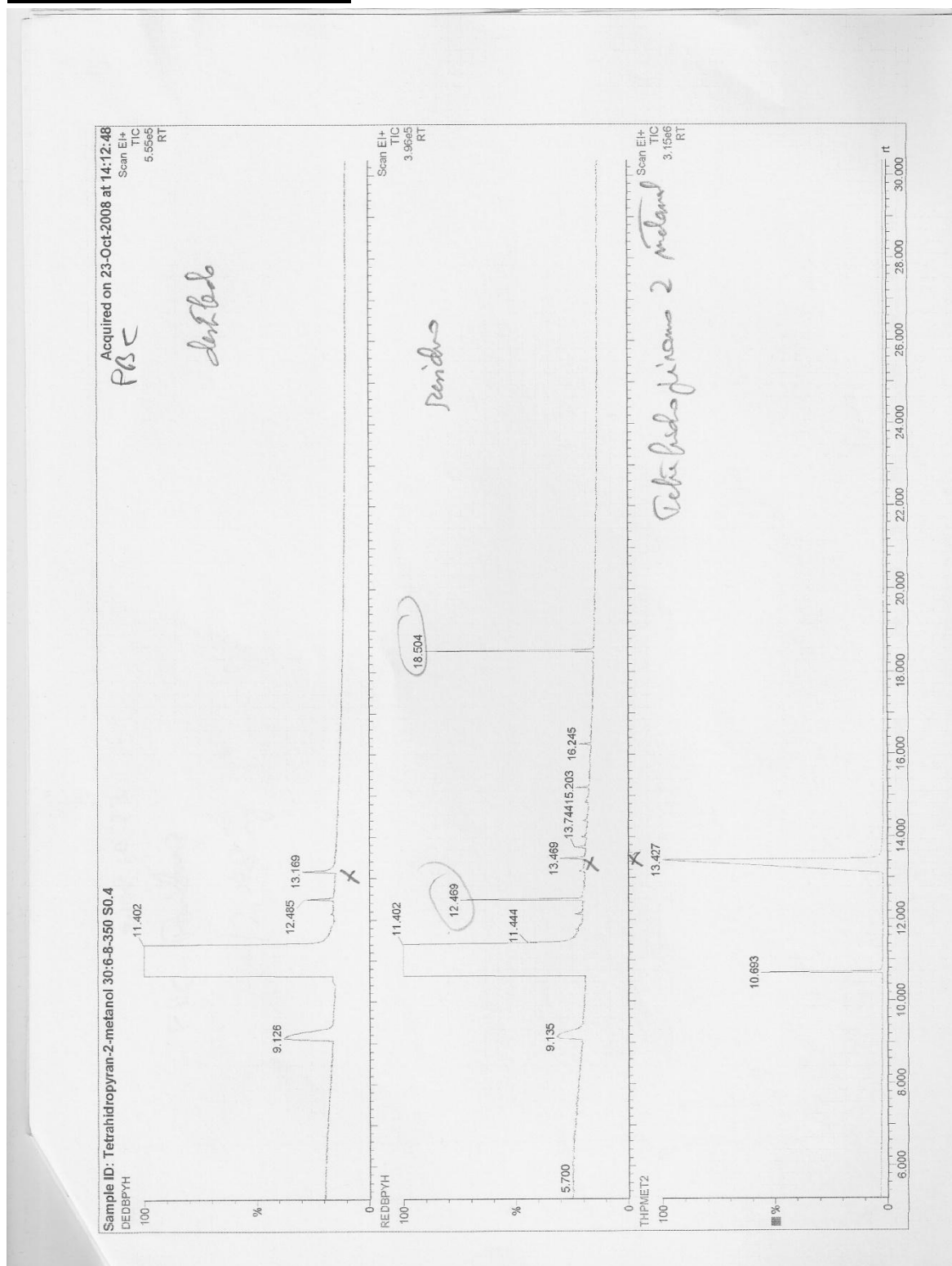


Figura 9.1: Traçado de corrente iónica total do destilado, resíduo e possível produto.

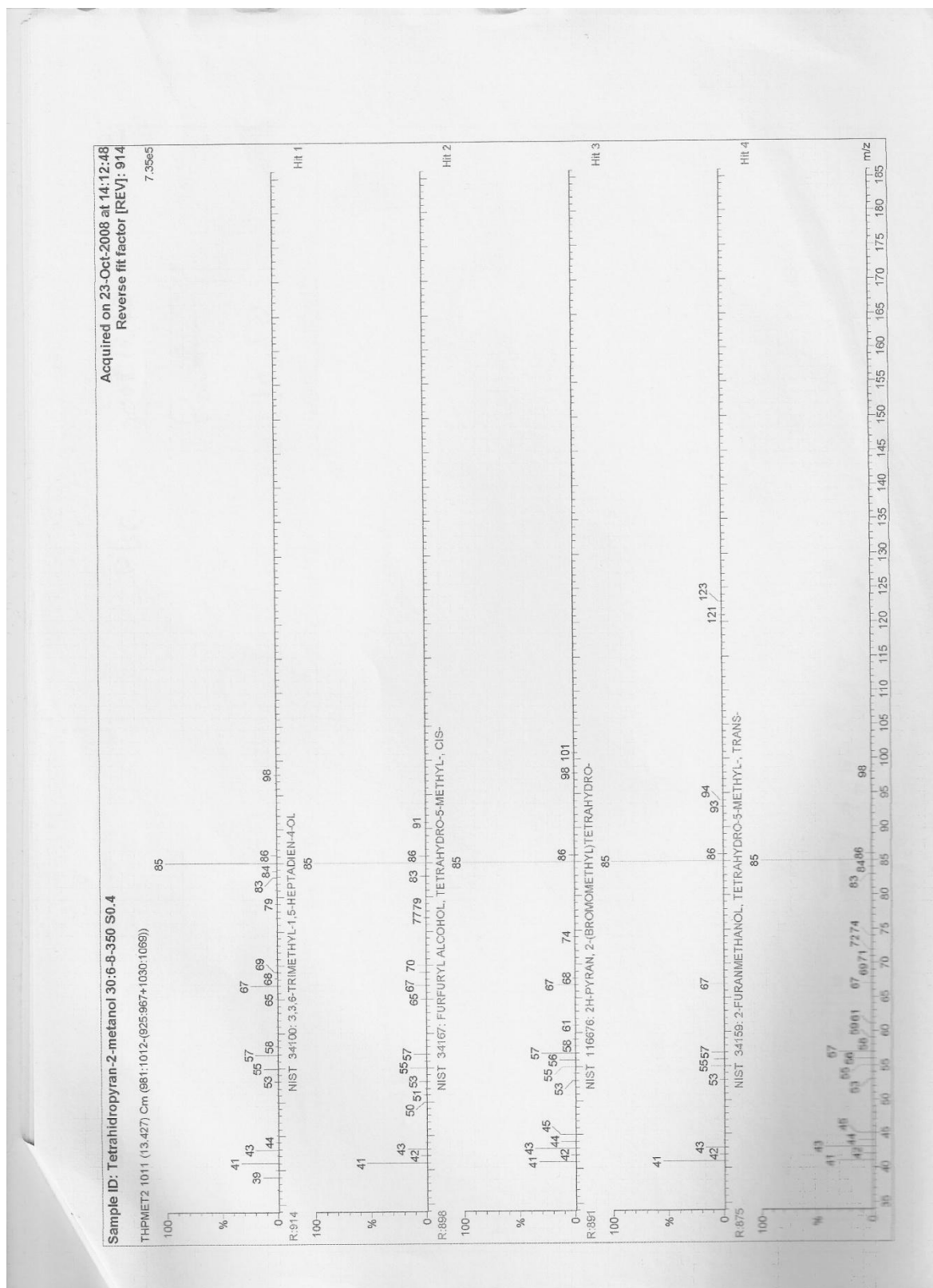


Figura 9.2: Espectros de massa de impacto electrónico do possível produto.

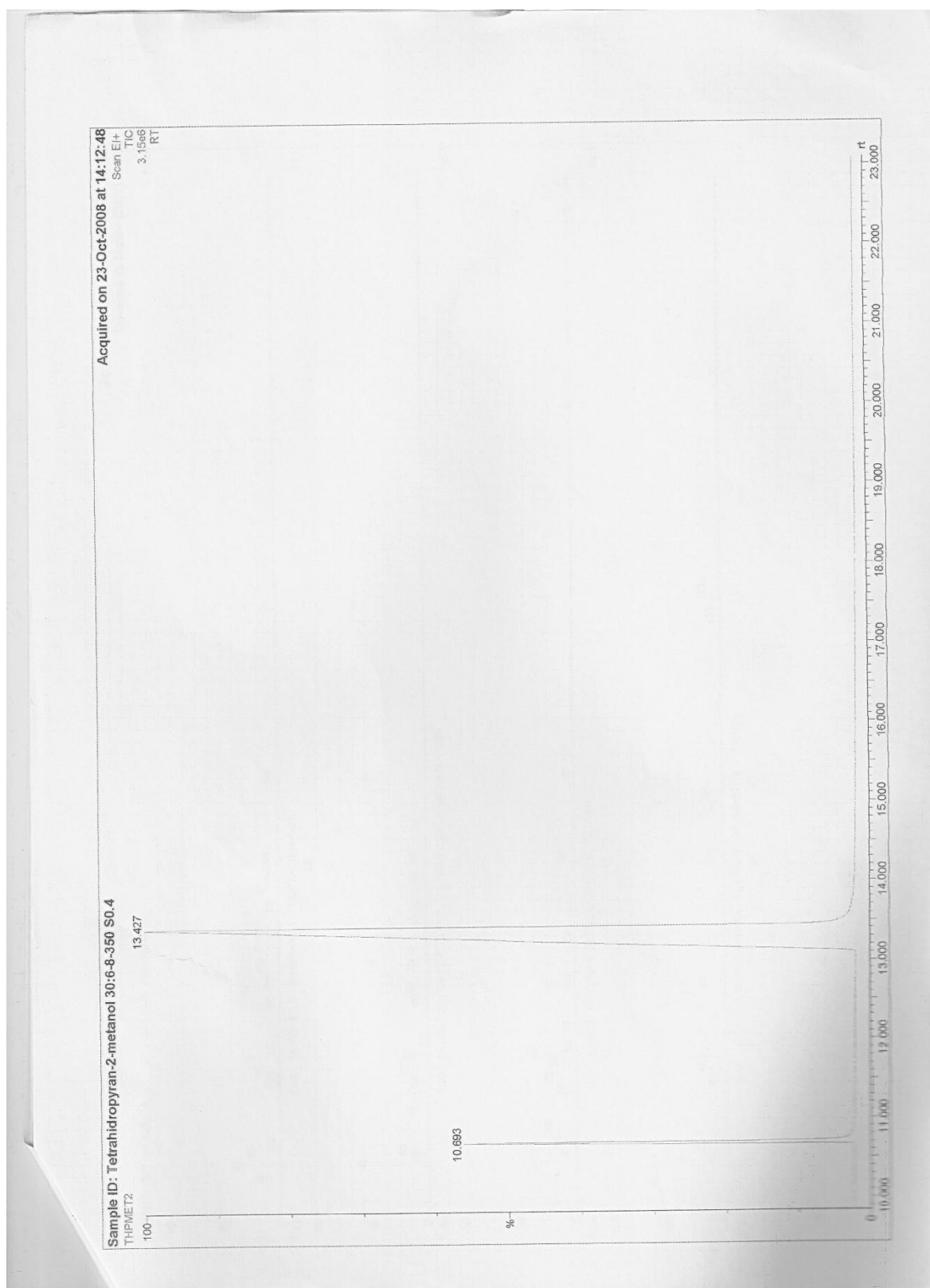


Figura 9.3: Traçado de corrente iônica do tempo de retenção 13,427 minutos.

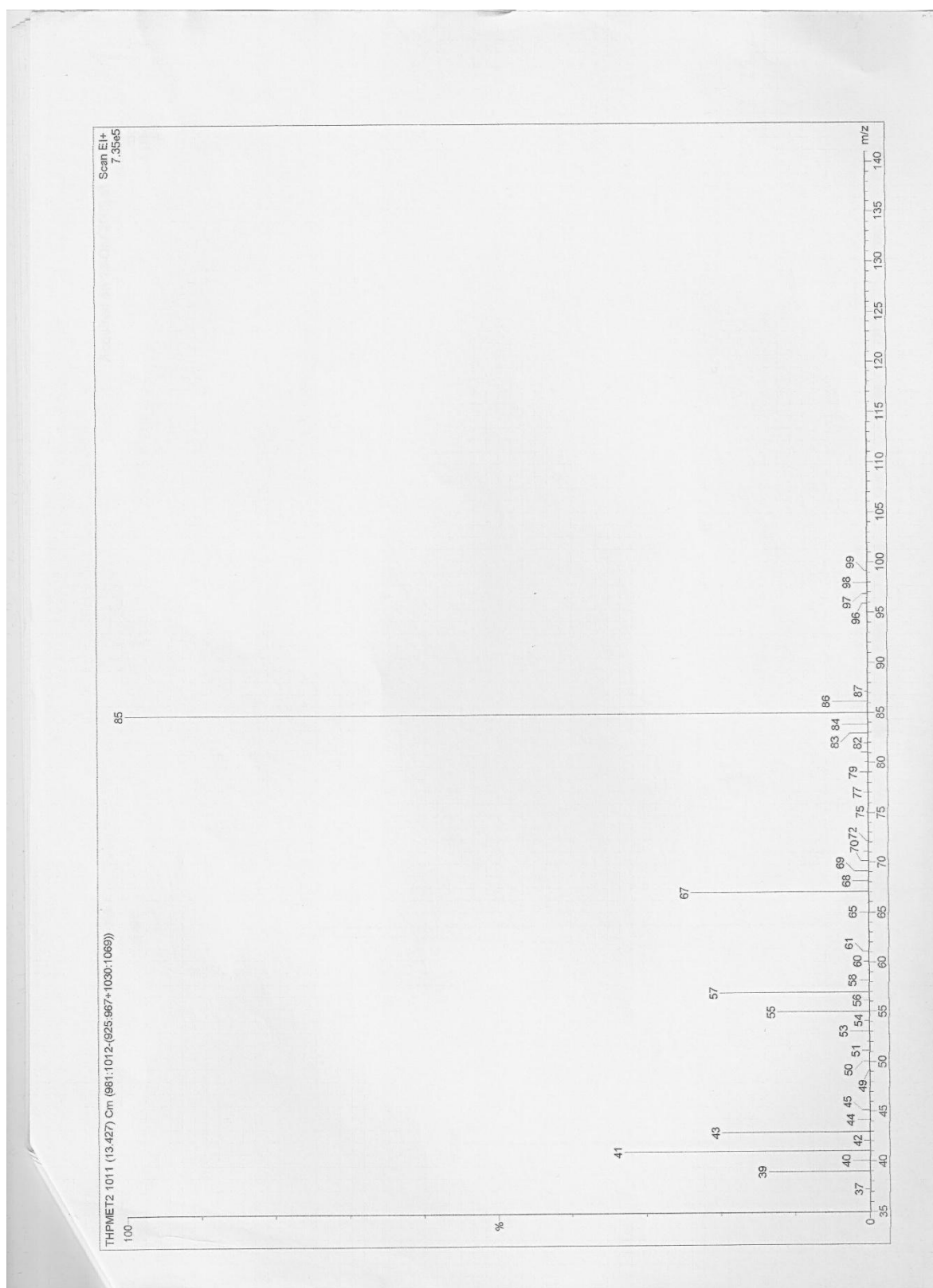


Figura 9.4: Espectro de massa de impacto electrónico do tempo de retenção 13,427 minutos.

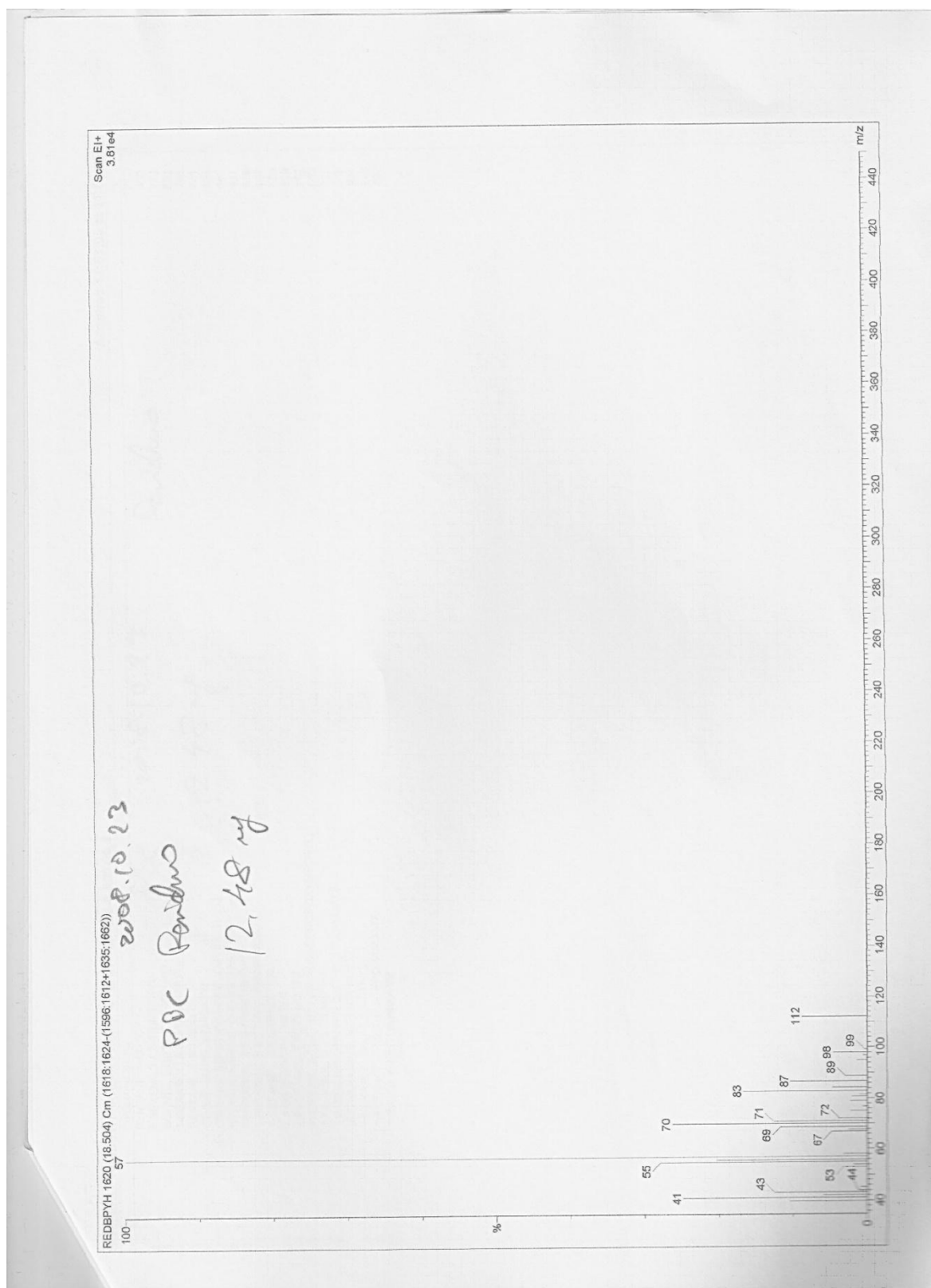


Figura 9.5: Espectro de massa de impacto electrónico do tempo de retenção 18,504 minutos do resíduo.

Espectros do dia 4 Novembro

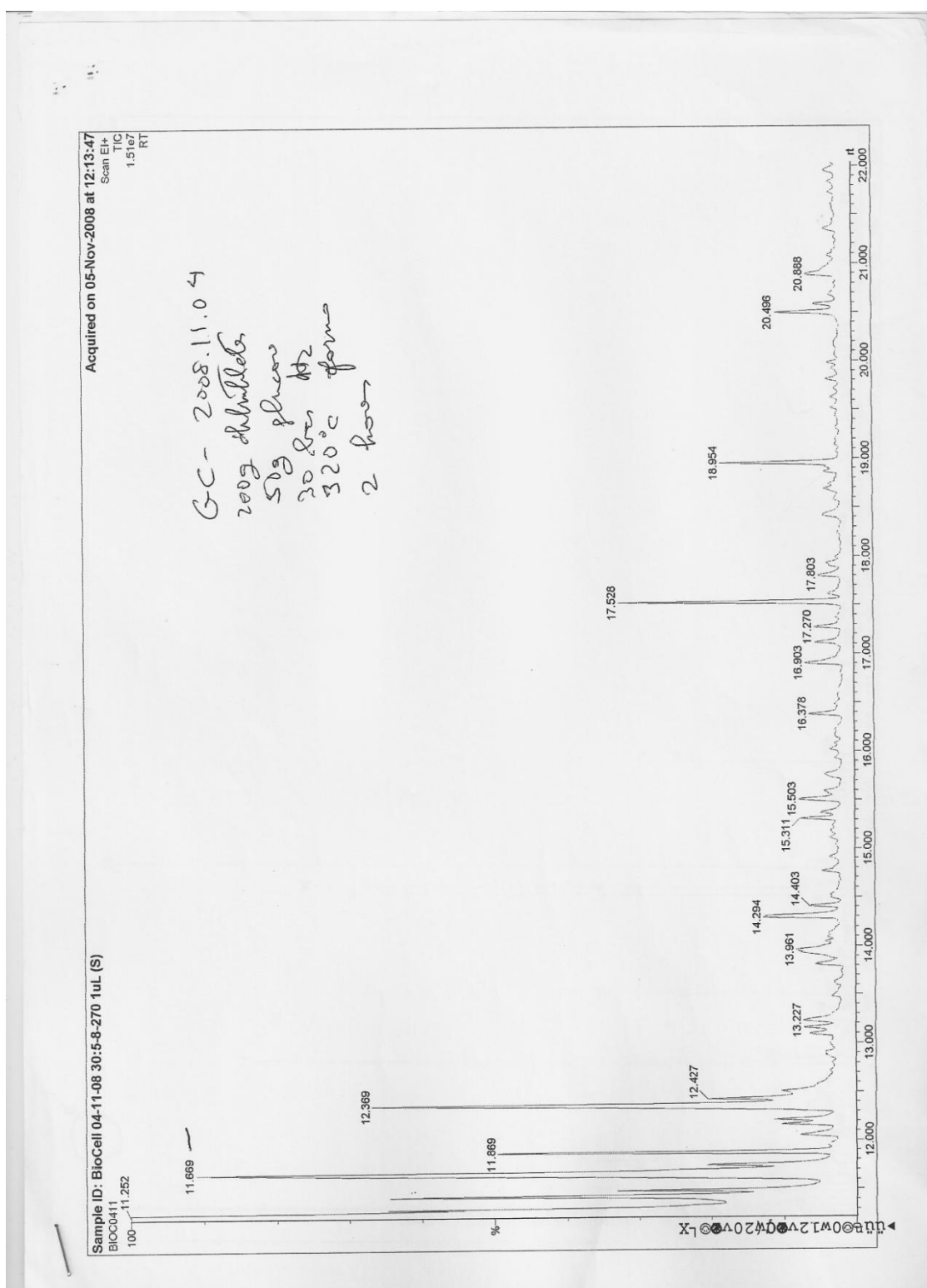


Figura 9.6: Traçado de corrente iónica dos tempos de retenção do dia 4 de Novembro.

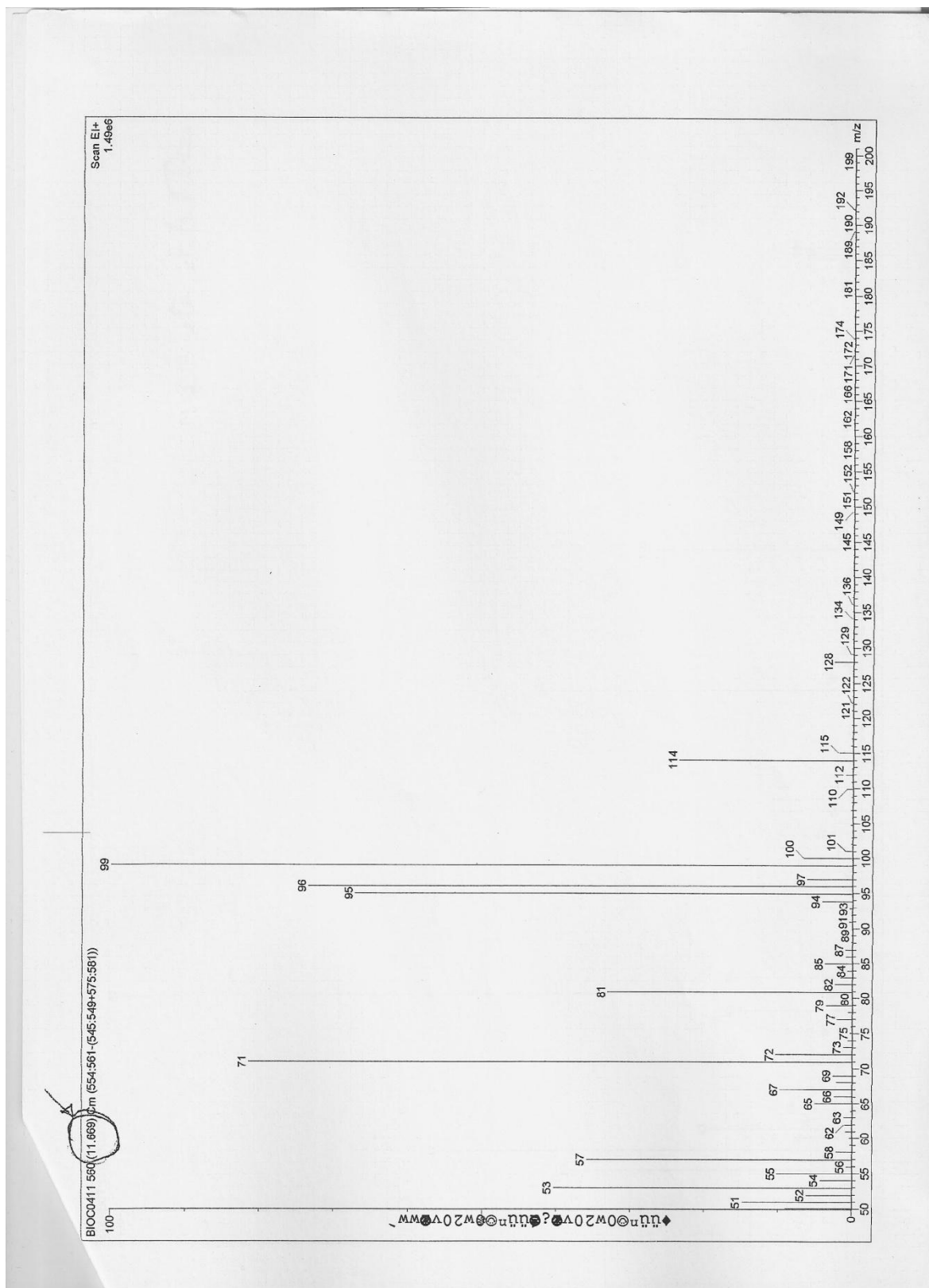


Figura 9.7: Espectro de massa de impacto electrónico do tempo de retenção 11,669 minutos.

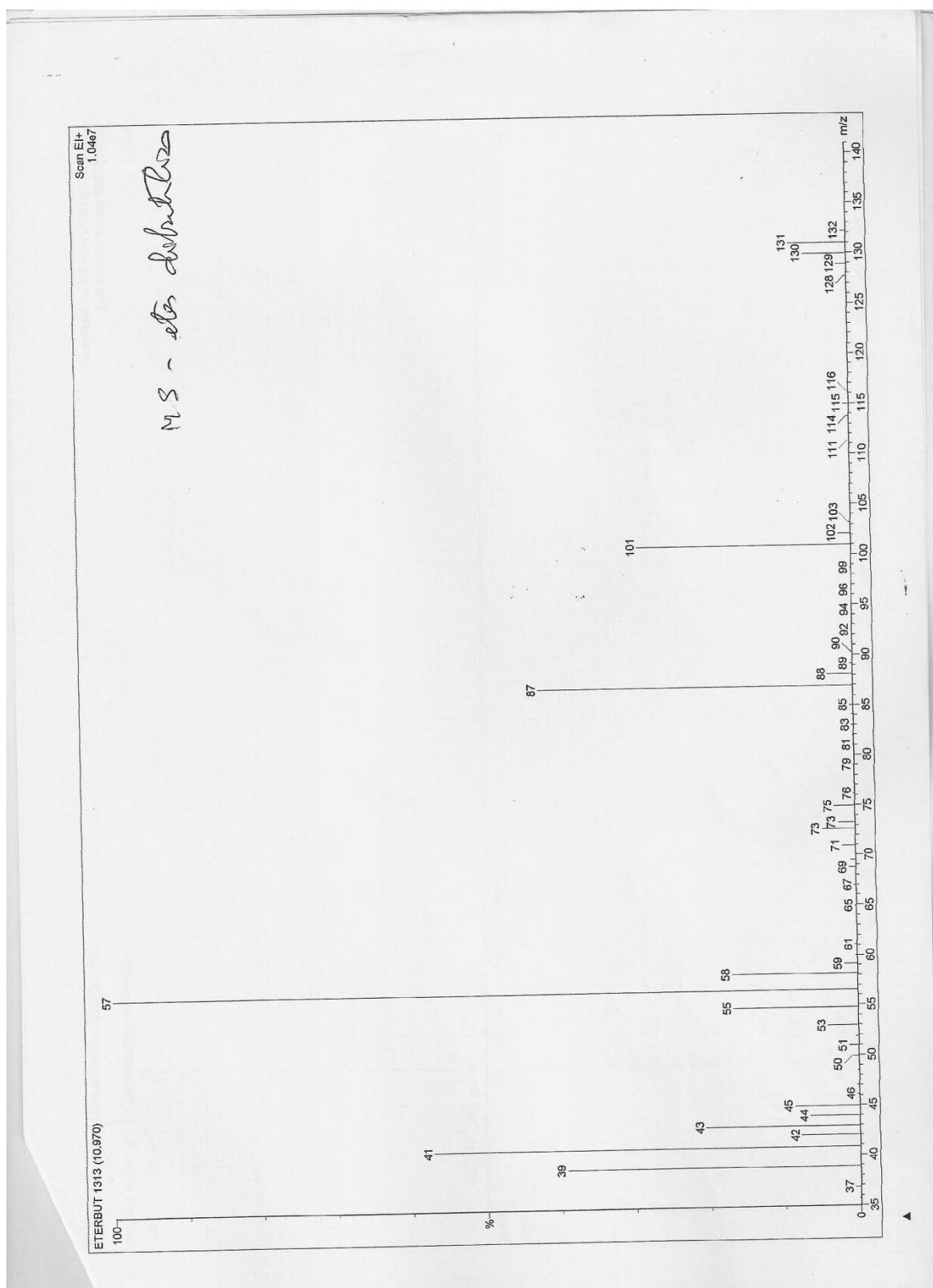


Figura 9.8: Espectro de massa de impacto electrónico do tempo de retenção 10,970 minutos - Éter dibutílico.

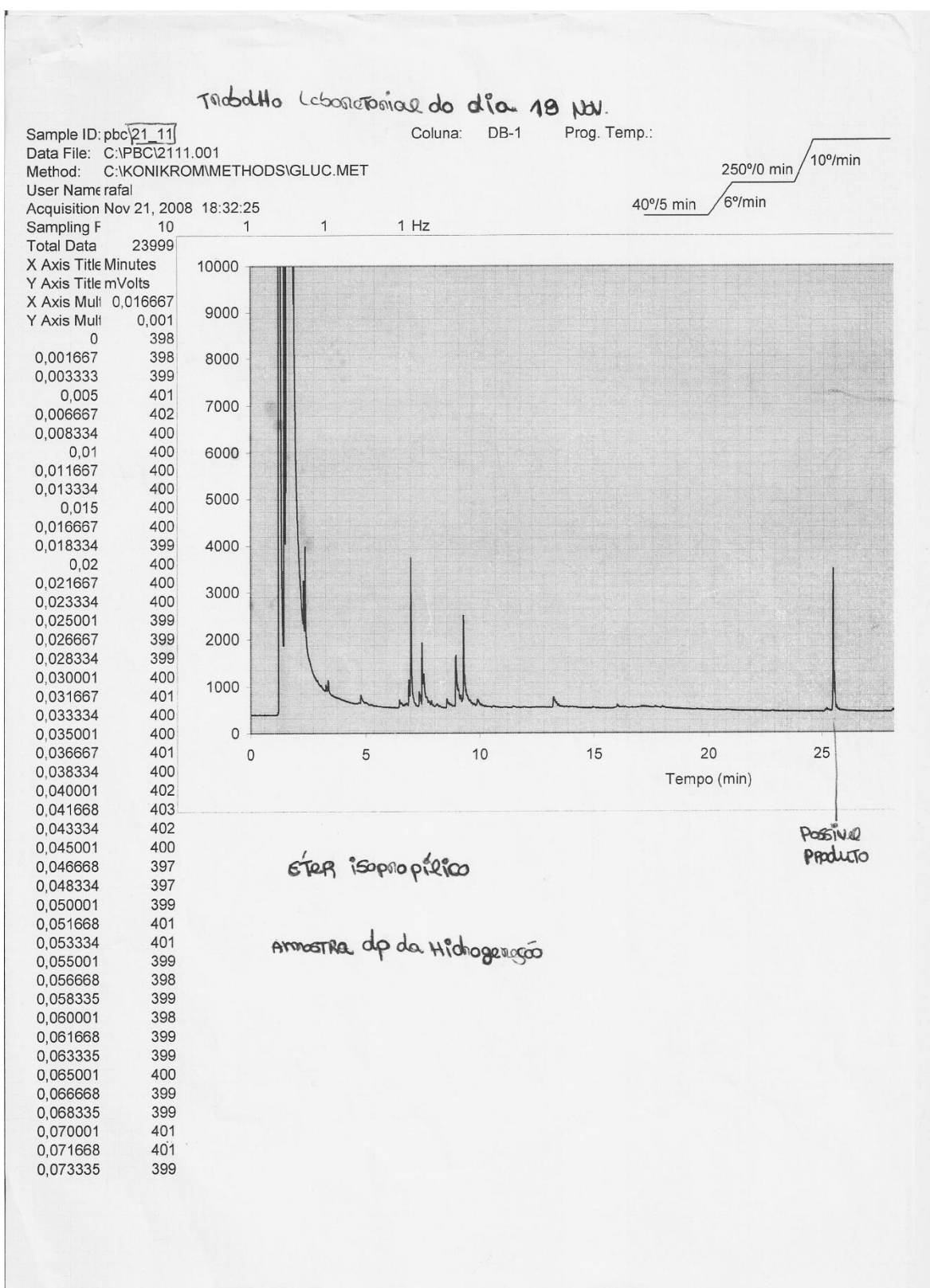


Figura 9.9: Traçado de corrente iônica dos tempos de retenção do dia 18 de Novembro.

Espectros do dia 27 Janeiro

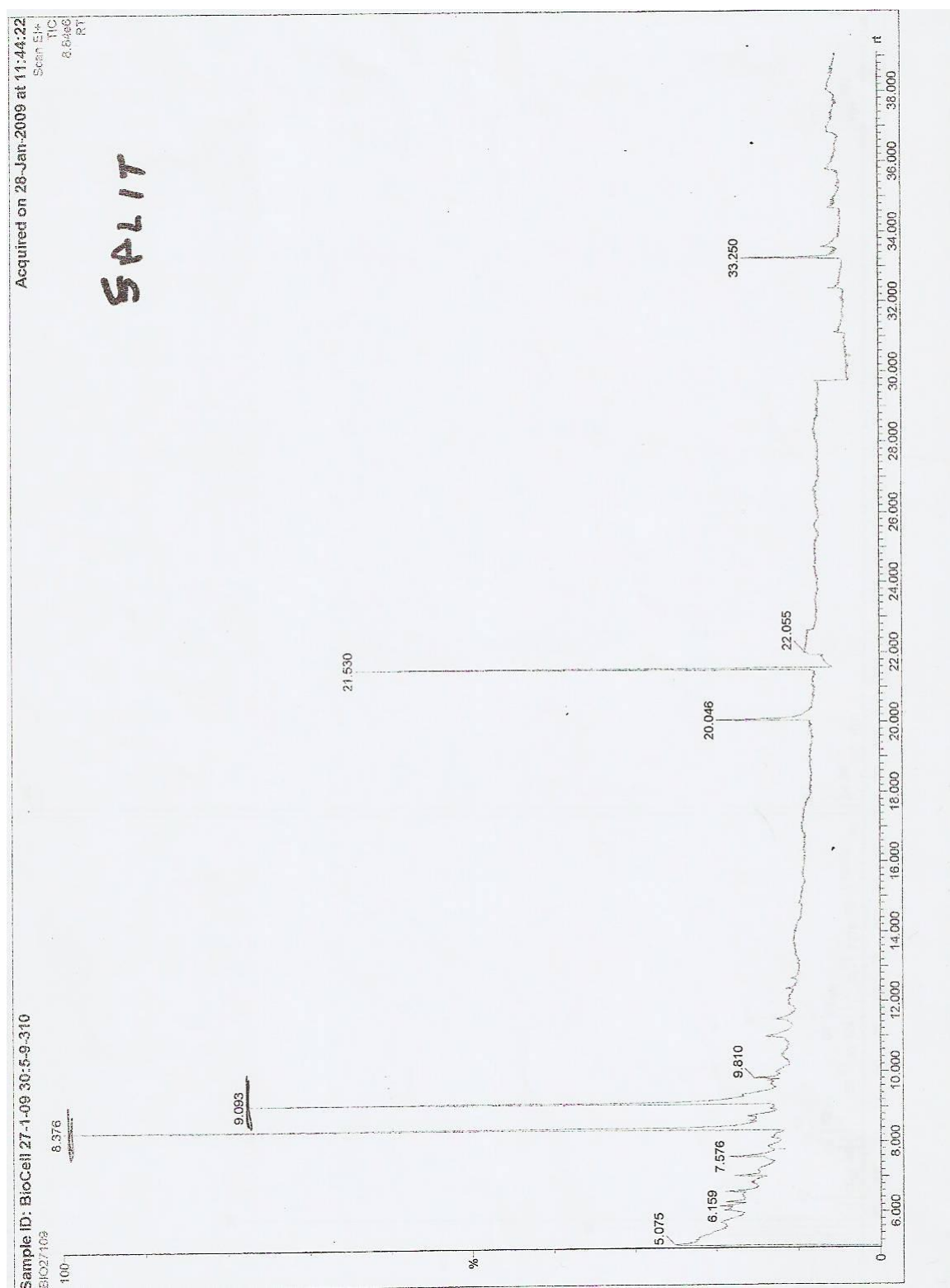


Figura 9.10: Traçado de corrente iónica dos tempos de retenção do dia 27 de Janeiro.

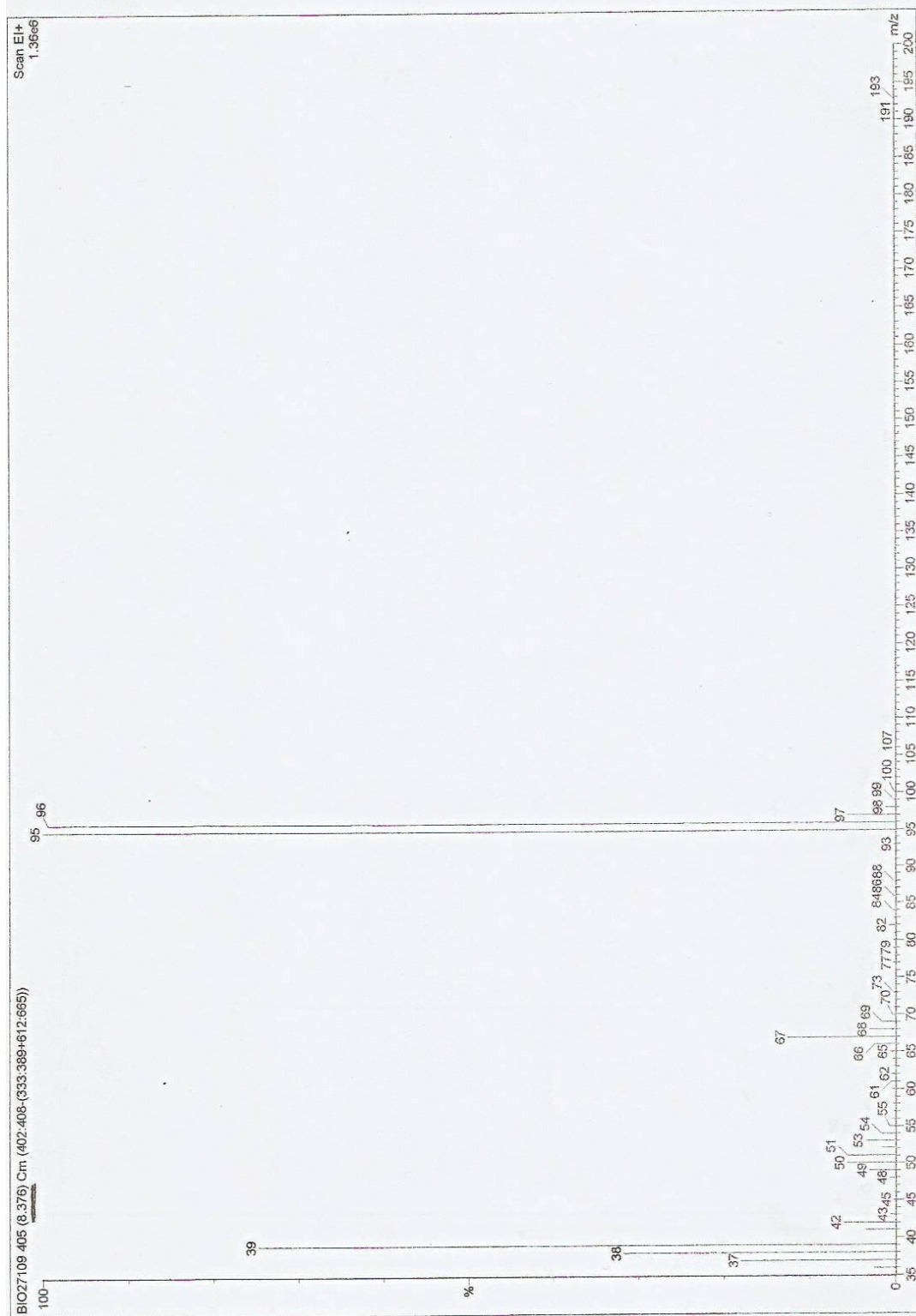


Figura 9.11: Espectro de massa de impacto electrónico do tempo de retenção 8.376 minutos.

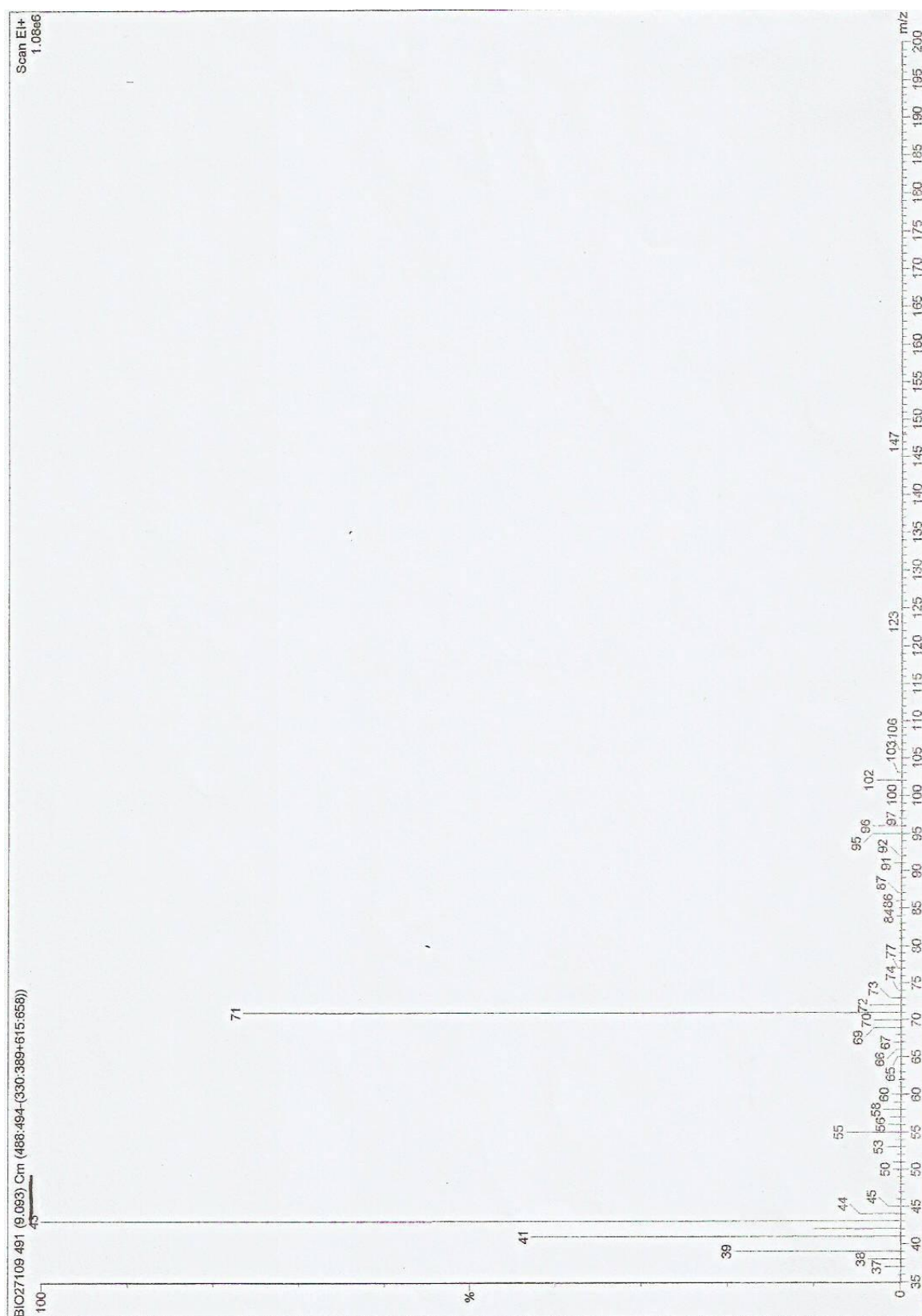


Figura 9.12: Espectro de massa de impacto electrónico do tempo de retenção 9.093 minutos.

2 – Espectros do dia 19 de Fevereiro 2009

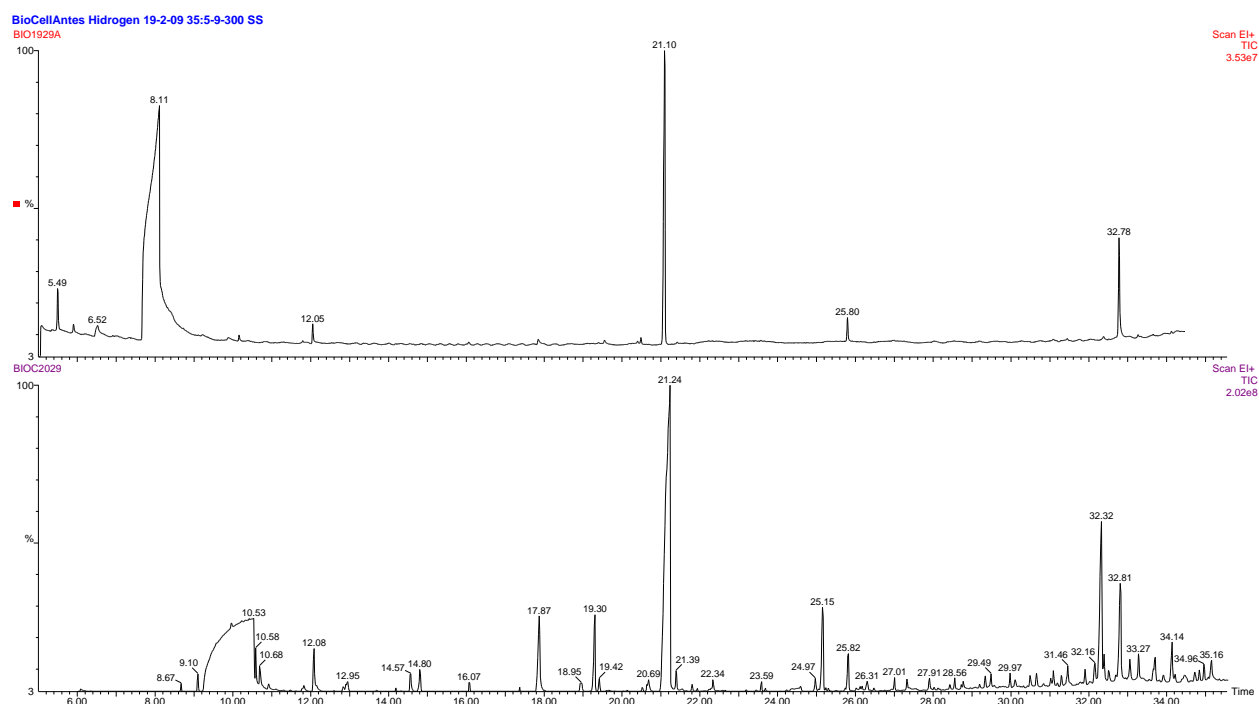


Figura 9.13: Traçado de corrente iónica dos tempos de retenção da amostra depois da hidrogenação.

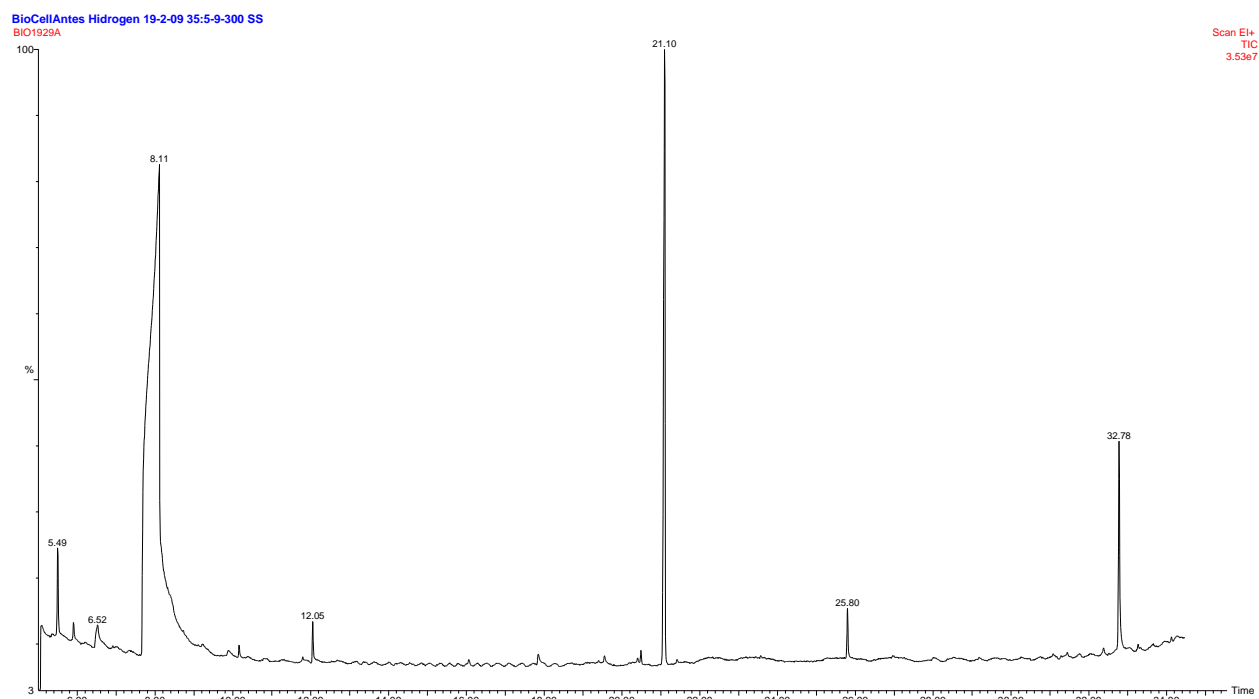


Figura 9.14: Traçado de corrente iónica dos tempos de retenção depois da Hidrogenação.

BioCellAntes Hidrogen 19-2-09 35:5-9-300 SS

BIO1929A 373 (8.111) Cm (318:396-(243:292+649:788))

Scan EI+
5.34e6

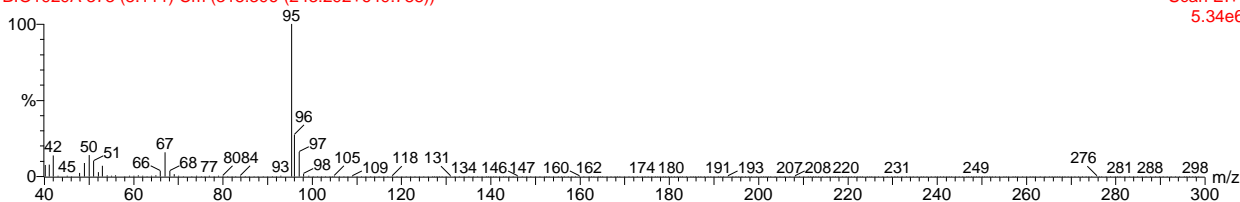


Figura 9.15: Espectro de massa do pico tr=8.11 min.

BioCellAntes Hidrogen 19-2-09 35:5-9-300 SS

BIO1929A 845 (12.047) Cm (844:848-(825:840+862:884))

Scan EI+
2.61e5

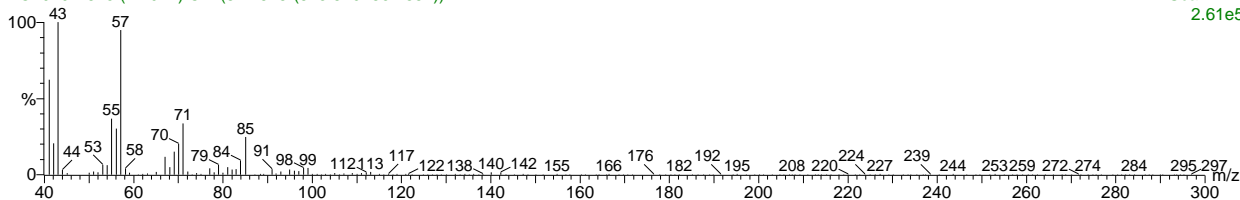


Figura 9.16: Espectro de massa do pico tr=12.05 minutos.

BioCellAntes Hidrogen 19-2-09 35:5-9-300 SS

BIO1929A 1930 (21.095) Cm (1921:1933-(1871:1906+1989:2068))

Scan EI+
1.67e6

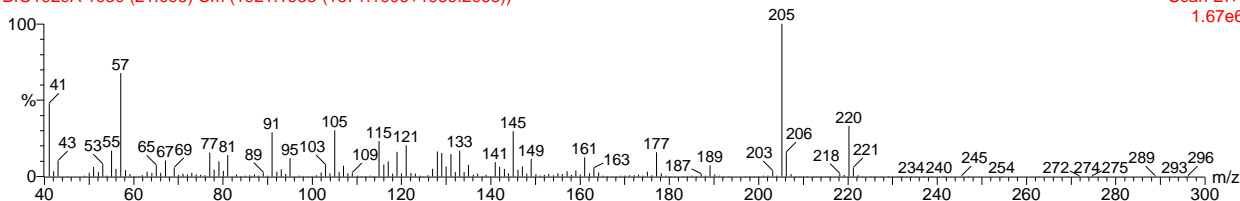


Figura 9.17: Espectro de massa do pico tr=21.10 minutos.

BioCellAntes Hidrogen 19-2-09 35:5-9-300 SS

BIO1929A 2494 (25.799) Cm (2491:2497-(2464:2485+2504:2522))

Scan EI+
3.12e5

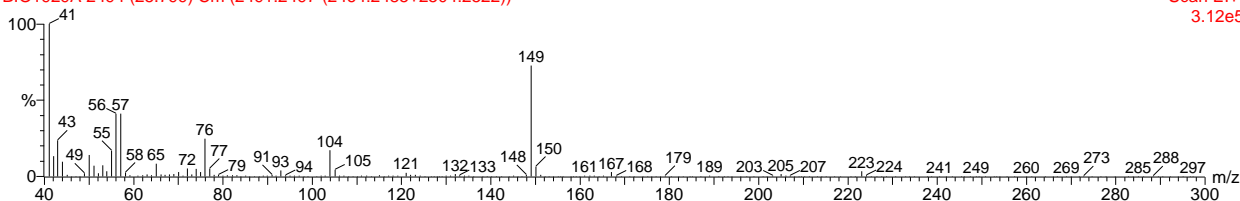


Figura 9.18: Espectro de massa do pico tr=25.80 minutos (ftalato).

BioCellAntes Hidrogen 19-2-09 35:5-9-300 SS

BIO1929A 3331 (32.778) Cm (3327:3336-(3290:3320+3351:3372))

Scan EI+
6.14e5

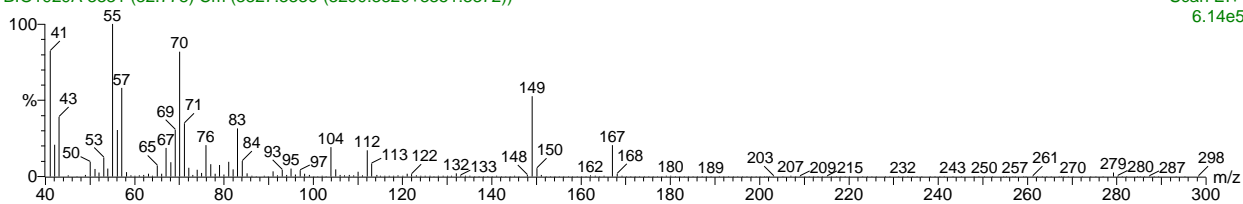


Figura 9.19: Espectro de massa do pico tr=32.78 minutos.

-Antes da hidrogenação

Biocell Hidrogenado 35:5-9-300 (SS) 1uL
BIOC2029

Scan EI+
TIC
2.02e8

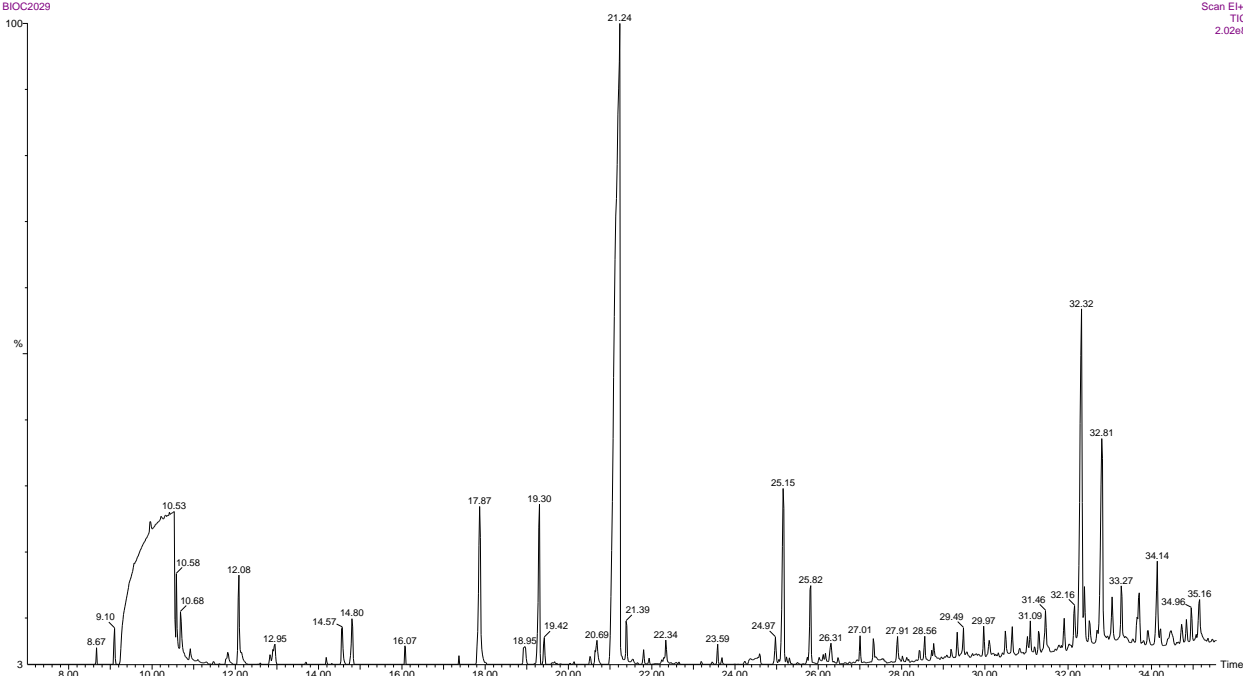


Figura 9.20: Traçado de corrente iônica dos tempos de retenção antes da hidrogenação.

Biocell Hidrogenado 35:5-9-300 (SS) 1uL

BIOC2029 265 (10.418) Cm (201:269-(313:334+95:180))

Scan EI+
7.44e6

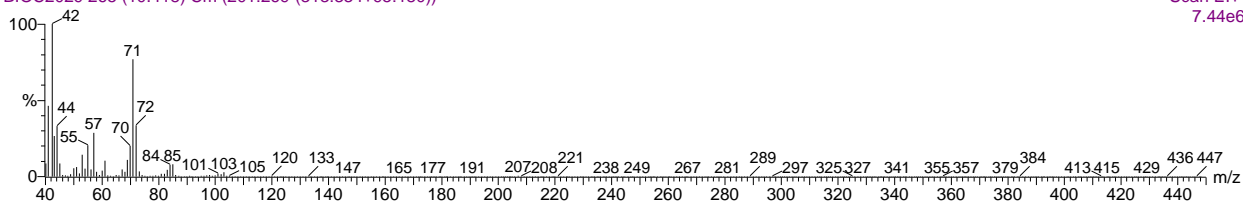


Figura 9.21: Espectro de massa do pico tr=10.53minutos.

Biocell Hidrogenado 35:5-9-300 (SS) 1uL

BIOC2029 365 (12.085) Cm (364:366-(357:361+376:383))

Scan EI+
3.60e6

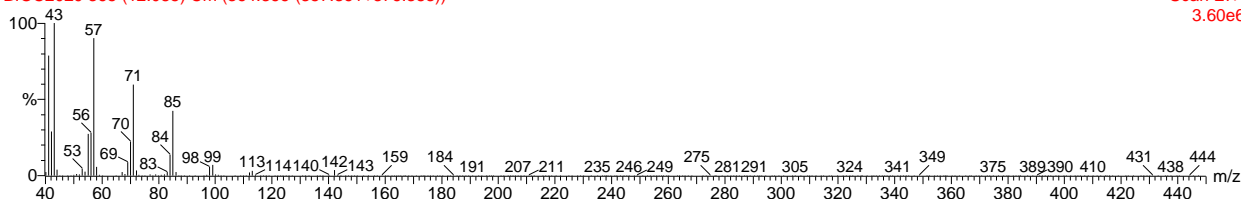


Figura 9.22: Espectro de massa do pico tr=12.08 minutos.

Biocell Hidrogenado 35:5-9-300 (SS) 1uL

BIOC2029 712 (17.870) Cm (709:714-(691:702+735:749))

Scan EI+
3.72e6

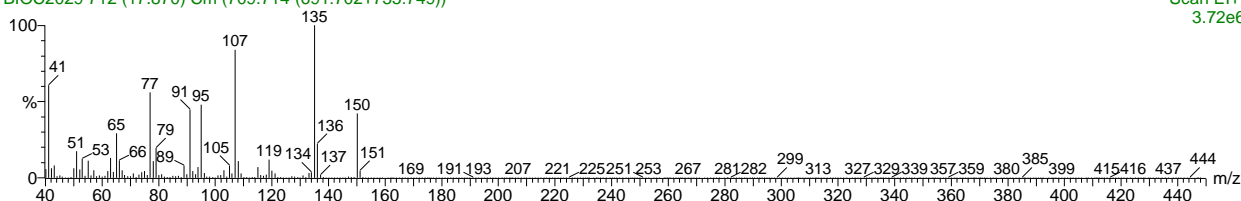


Figura 9.23: Espectro de massa do pico tr=17.87 minutos.

Biocell Hidrogenado 35:5-9-300 (SS) 1uL

BIOC2029 798 (19.303) Cm (795:798-(783:789+831:839))

Scan EI+
2.63e6

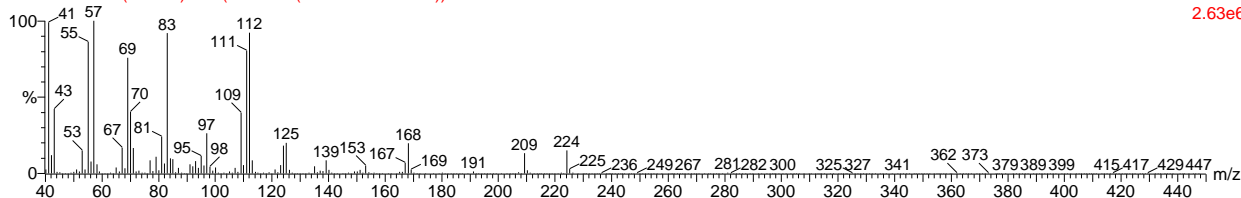


Figura 9.24: Espectro de massa do pico tr=19.30 minutos.

Biocell Hidrogenado 35:5-9-300 (SS) 1uL

BIOC2029 914 (21.237) Cm (901:914-(888:896+929:942))

Scan EI+
6.73e6

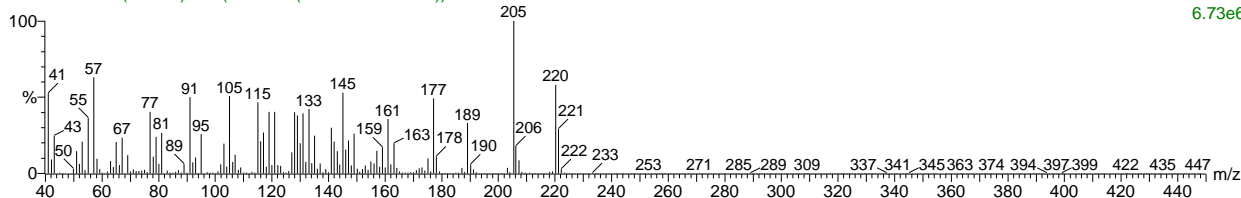


Figura 9.25: Espectro de massa do pico tr=21.24 minutos.

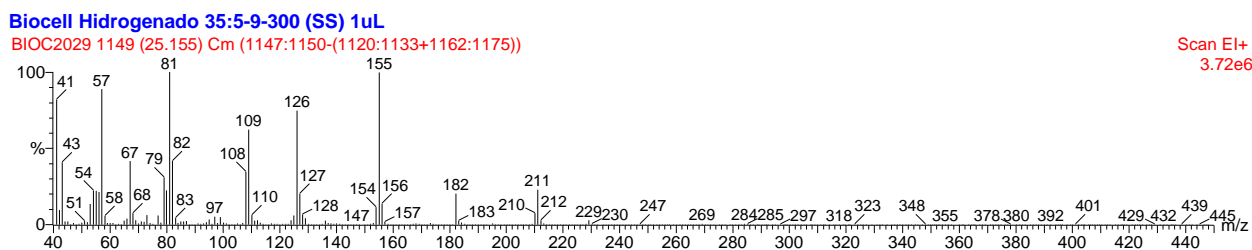


Figura 9.26: Espectro de massa do pico tr=25.15 minutos.

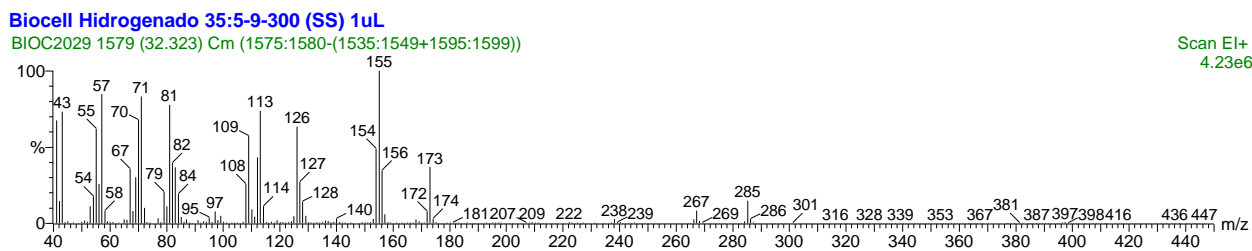


Figura 9.27: Espectro de massa do pico tr=32.32 minutos.

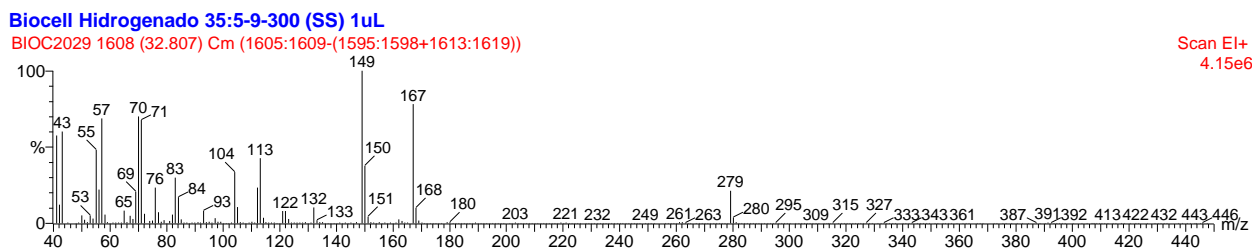


Figura 9.28: Espectro de massa do pico tr=32.81 minutos.

9.2. Fichas de segurança

- Éter etílico
- Piranona
- Cloreto de *N*-metilimidazole
- Hidrogénio
- Azoto
- Celulose
- Ácido Clorídrico
- *N*-metilimidazole
- Furfural
- Álcool Furfurílico
- Éter isopropílico

1. Informação de Produto e de Companhia

Nome do Produto	DYETHYL ETHER, ANHYDROUS, >=99.0%, A.C.S. REAGENT
Referência do Produto	179264
Marca	<i>Sigma-Aldrich</i>
Companhia	Sigma-Aldrich Química SA Apt Correos 161 P-2810 ALCOBENDAS-MADRID
Telefone	+351 1-661-9977
Número de Fax	+351 1-661-9642
Número de Telefone de Emergência	+34 609 146286
Endereço de e-mail	eutrchserv@sial.com

2. Identificação dos Componentes

Sinónimos	Aether * Anaesthetic ether * Anesthesia ether * Anesthetic ether * Diaethylaether (German) * Diethyl ether (DOT:OSHA) * diethyl oxide * Dwuetylowy eter
Fórmula	C ₄ H ₁₀ O
Peso Molecular	74.12 g/mol
No. CAS	60 – 29 – 7
No. CE	200 – 467 – 2
No. Index	603 – 022 – 00 – 4
Classificação	F, Xi, R11- R36- R66- R67
Concentração [%]	-

3. Identificação dos Perigos

Efeitos adversos à Saúde Humana	Extremamente inflamável. Pode formar peróxidos explosivos. Nocivo se ingerido. A exposição repetida pode levar à desidratação de pele ou ao aparecimento de gretas. Os vapores podem causar sonolência e tonturas.
--	--

4. Medidas de Primeiros Socorros

Recomendação geral	Consultar um médico. Mostrar esta ficha de segurança ao médico.
Inalação	Se inalado, levar a pessoa para o ar fresco. Se não respirar, aplicar a respiração artificial. Consultar um médico.
Contacto com a pele	Lavar com sabão e muita água. Consultar um Médico
Contacto com os olhos	Lavar cuidadosamente com muita água, durante pelo menos quinze minutos, e consultar o médico.
Ingestão	Não provocar vômitos. Nunca dar nada pela boca a uma pessoa inconsciente. Enxaguar a boca com água. Consultar um médico.

5. Medidas de Combate a Incêndios

Meios de extinção adequados	Para fogos incipientes ou pequenos usar meios como espuma de álcool, pó seco ou dióxido de carbono. Para fogos grandes usar grandes quantidades água, aplicadas como nevoeiro ou spray; córregos sólidos de água podem não ser efectivos. Esfriar todos os depósitos ou vasilhas com grandes quantidades de água.
Perigos específicos	Flash-back possível acima de uma distância considerável. Pode ocorrer a explosão do recipiente em situações de incêndio.
Equipamento de protecção especial para o combate a incêndios	Usar equipamento de respiração autónomo para combate a incêndios, se necessário.
Outras informações	Os jactos de água podem ser utilizados para arrefecer os contentores fechados.

6. Medidas no caso de fugas acidentais

Precauções Individuais	Usar equipamento de protecção individual. Evitar a respiração do vapor/névoa/gás. Assegurar ventilação adequada. Retirar todas as fontes de ignição. Atenção com a acumulação de vapores que pode formar concentrações explosivas, estes podem-se acumular nas áreas baixas.
-------------------------------	--

Precauções ambientais	Não permitir a entrada do produto no sistema de esgotos.
Métodos de limpeza	Controlar e recuperar o líquido derramado com um produto absorvente não combustível, (por exemplo: areia, terra, terra diatomácea) e colocar o líquido em contentores para eliminação de acordo com as regulações locais / nacionais (ver secção 13).

7. Manuseamento e Armazenagem

Manuseamento	Evitar o contacto com a pele e os olhos. Evitar a inalação do vapor ou da névoa. Manter afastado de qualquer chama ou fonte de ignição – Não fumar. Tomar medidas para impedir a formação de electricidade estática.
Armazenagem	Guardar o recipiente hermeticamente fechado em lugar seco, fresco e bem ventilado. Os contentores abertos devem ser cuidadosamente fechados de novo e devem ficar direitos para evitar a dispersão.

8. Controlo de exposição/Protecção individual

Protecção respiratória	Nos casos em que a avaliação de risco mostrar que as máscaras purificadoras de ar são apropriadas, usar uma máscara de cobertura facial total com cartuchos de combinação multi-objectivos (E.U.A.) ou do tipo ABEK (EN 14387) como apoio a controlos de engenharia.
Protecção das mãos	Usar luvas. As luvas de protecção seleccionadas devem satisfazer as especificações da Directiva da UE 89/689/CEE e o standard EN 374 derivado dele.
Protecção dos olhos	Óculos de segurança química.
Protecção do corpo e da pele	Escolher uma protecção para o corpo conforme a quantidade e a concentração das substâncias perigosas no local de trabalho.
Medidas de higiene	Manusear de acordo com as boas práticas industriais de higiene e segurança. Lavar as mãos antes de interrupções, e no final do dia de trabalho.

9. Propriedades Físicas e Químicas

Aspecto	Estado Físico: líquido, claro Cor: incolor
pH	Dados não disponíveis.
Ponto de Fusão	-116 °C
Ponto de ebulição	34,6 °C
Ponto de Inflamação	-40 °C
Temperatura de ignição	160 °C
Limites de explosão, inferior	1,8 % (V)
Limites de explosão, superior	48 % (V)
Pressão de vapor	442,6 mmHg a 20 °C
Densidade	0,706 g/cm ³
Densidade do vapor	2,6 g/l

10. Estabilidade e Reactividade

Estabilidade em armazenamento	Estável sob as condições recomendadas de armazenamento.
Condições a evitar	Calor, chamas, faíscas. Exposição à humidade.
Matérias a evitar	Oxidantes e Agentes redutores fortes.
Produtos perigosos de decomposição formados durante os incêndios	Óxidos de carbono

11. Informação Toxicológica

Sinais e sintomas de exposição	Depressão do sistema nervoso central, distúrbios gastrointestinais, narcose.
Inalação	Muito perigoso se inalado. Pode causar irritação do aparelho respiratório, sonolência e vertigens.
Pele	Pode ser perigoso se absorvido pela pele. Pode causar irritação da pele, secura da pele ou fissuras, por exposição repetida.
Olhos	Causa irritação nos olhos.
Ingestão	Pode ser perigoso se ingerido.

Órgãos alvo	Sistema nervoso central.
--------------------	--------------------------

12. Informação Ecológica

Informação sobre eliminação	Dados não disponíveis.
Efeitos ambientais	<p>Toxicidade em peixes: mortalidade NOEC – Cyprinodon variegatus – 400 mg/l – 96 h CL50 – Pimephales promelas (vairão gordo) – 3.130 – 3.320 mg/l – 96 h Toxicidade em dáfrias e outros invertebrados aquáticos: CL50 - Daphnia magna - > 520 mg/l - 48 h CE50 – Daphnia magna – 7.060 mg/l – 24 h</p>
Informações suplementares sobre a ecologia	Dados não disponíveis.

13. Informações para a eliminação dos resíduos

Produto	Queimar num incinerador químico equipado com pós-combustor e purificador de gases, tomando precauções adicionais ao colocar esse material em ignição, visto que é altamente inflamável. Observar todos os regulamentos ambientais federais, estaduais e locais. Entrar em contacto com um serviço profissional credenciado de descarga de lixo para eliminar esse material.
Embalagens Contaminadas	Eliminar como produto Não utilizado.

14. Informações Relativas ao Transporte

ADR/RID	<p>No. ONU: 1193 Classe: 3 Grupo de embalagem: II Denominação de expedição correcta: ETHYL METHYL KETONE</p>
IMDG	No. ONU: 1193

	Classe: 3 Grupo de embalagem: II Denominação de expedição correcta: ETHYL METHYL KETONE
IATA	No. ONU: 1193 Classe: 3 Grupo de embalagem: II Denominação de expedição correcta: ETHYL METHYL KETONE

15. Informação sobre Regulamentação

Rotulado de acordo com as directivas da CE	
Símbolos de perigo	F, Facilmente inflamável Xi, Irritante
Frase (s) – R	R11 Facilmente irritável. R36 Irritante para os olhos. R66 Pode provocar secura da pele ou fissuras, por exposição repetida. R67 Pode provocar sonolência e vertigens por inalação de vapores.
Frase (s) – S	S 9 Manter o recipiente num local bem ventilado. S16 Manter afastado de qualquer chama ou fonte de ignição - Não fumar.

16. Outras informações

Direitos exclusivos, 2007, da *Sigma-Aldrich*. Permissão concedida para fazer número ilimitado de cópias em papel, somente para uso interno. Acredita-se que as informações acima estejam correctas, embora não pretendam ser totalmente abrangentes, devendo ser usadas apenas como um guia. A *Sigma-Aldrich* não deverá ter responsabilidade legal por quaisquer danos resultantes do manuseio ou do contacto com o produto acima. Consultar o verso da factura ou nota que acompanha o produto para tomar conhecimento dos termos adicionais e condições de venda.

1. Informação de Produto e de Companhia

Nome do Produto	2H – Pyran-2-one, 90%
Referência do Produto	463159
Companhia	<i>Sigma-Aldrich</i> Sucursal em Portugal Centro Escritórios Sintra Nascente, A. Alm. Gago Coutinho, P-2710 Sintra
Número de telefone do serviço técnico	351 21 924 25 55
Número de Fax	351 21 924 26 10
Número de Telefone de Emergência	0034 609 14 62 86
Endereço de e-mail	Eutrchserv@sial.com

2. Identificação dos Componentes

Fórmula	C ₅ H ₄ O ₂
Peso Molecular	96.09 g/mol
No. CAS	50-31-4
No. CE	207-990-5
No. Do índice do Anexo I	Nenhum
Concentração [%]	90%

3. Identificação dos Perigos

Nenhum dado disponível.

4. Medidas de Primeiros Socorros

Inalação	Levar o paciente para o ar fresco. Em caso de ausência de respiração, administrar respiração artificial.
Contacto com a pele	Lavar a pele imediatamente com sabão e água em abundância.
Contacto com os olhos	Lavar os olhos com água em abundância, por, no mínimo, 15 minutos.
Ingestão	Lavar a boca com água desde que a pessoa esteja consciente. Chamar um médico.

5. Medidas de Combate a Incêndios

Meios de extinção adequados	Borrifo de água. Dióxido de carbono, pó químico seco ou espuma adequada.
Equipamento de protecção especial para o combate a incêndios	Usar aparelho de respiração autónomo e fato de protecção para impedir o contacto com a pele e com os olhos.

6. Medidas no caso de fugas accidentais

Precauções Individuais	Usar máscara, óculos de segurança química, botas de borracha e luvas pesadas de borracha.
Métodos de limpeza	Absorver o produto com areia ou vermiculita e colocar em recipientes fechados para ser descartado. Ventilar a área e lavar o local contaminado depois de terminar o recolhimento do material.

7. Manuseamento e Armazenagem

Manuseamento	Evitar a inalar o produto. Evitar o contacto com os olhos, pele e vestimentas. Evitar exposição prolongada ou repetida.
Armazenagem	Manter o recipiente hermeticamente fechado. Armazenar entre 2 e 8 graus.

8. Controlo de exposição/Protecção individual

Controlos mecânicos	Duche de segurança e lava-olhos. Requer exaustão mecânica.
Medidas de higiene	Lavar as vestimentas contaminadas antes de utilizá-las novamente.
Protecção respiratória	Nos casos em que a avaliação de risco mostrar que as máscaras purificadoras de ar são apropriados, usar uma máscara de cobertura facial total com cartuchos de combinação multi-objectivos (E.U.A.) ou do tipo ABEK (EN 14387) como apoio a controlos de engenharia.
Protecção das mãos	Luvas compatíveis resistentes a produtos químicos
Protecção dos olhos	Óculos de segurança química.

9. Propriedades Físicas e Químicas

Aspecto	Estado Físico: líquido, claro Cor: marron – amarelo muito escuro
pH	N/A
Ponto de Fusão	8.0 – 9.0 °C
Ponto de ebulição	104 °C, 30 mmHg
Ponto de Inflamação	94 °C – método: copa fechada
Peso específico / densidade	1.21 g/cm ³

10. Estabilidade e Reactividade

Estabilidade	Produtos a evitar: Agentes oxidantes fortes.
Produtos de decomposição perigosos	Monóxido de carbono, dióxido de carbono.

11. Informação Toxicológica

Sinais e sintomas de exposição	Até onde sabemos, as propriedades químicas, físicas e toxicológicas não foram minuciosamente investigadas.
Via de exposição	Contacto cutâneo: Pode provocar irritação da pele. Contacto ocular: Pode provocar irritação nos olhos. Inalação: O material pode ser irritante para as membranas mucosas e para o trato respiratório superior. Diferentes vias de administração: Pode ser nocivo por inalação, ingestão ou absorção cutânea.

12. Informação Ecológica

Nenhum dado disponível.

13. Informações para a eliminação dos resíduos

Eliminação da substância	Dissolver ou misturar o material com um solvente combustível e queimar num incinerador químico equipado com pós-combustor e purificador de gases. Analisar todos os regulamentos ambientais federais e locais.
---------------------------------	--

14. Informações Relativas ao Transporte

ADR/RID	Não é perigoso para transporte via rodoviária.
IMDG	Não é perigoso para transporte via marítima.
IATA	Não é perigoso para transporte via aérea.

15. Informação sobre Regulamentação

Classificação e etiquetagem segundo as directivas de EU	
Frase (s) – S	S23 – 24/25 Não inalar o vapor. Evitar o contacto com a pele e os olhos.
Informação específica para cada país	WGK (Classificação Alemã de Perigosidade para o Ambiente Aquático): 3

16. Outras informações

Garantia	Acredita-se que as informações acima estejam correctas, embora não pretendam ser totalmente abrangentes, devendo ser usadas apenas como um guia. A <i>Sigma-Aldrich</i> não deverá ter responsabilidade legal por quaisquer danos resultantes do manuseio ou do contacto com o produto acima. Consultar o verso da factura ou nota que acompanha o produto para tomar conhecimento dos termos adicionais e condições de venda. Direitos exclusivos, 2007, da <i>Sigma-Aldrich Co.</i> Permissão concedida para fazer número ilimitado de cópias em papel, somente para uso interno.
Aviso Legal	Deve ser usado somente para I+D e investigação. Não é apto para fabricação de medicamentos, material de uso doméstico ou outros usos.

FICHA DE DADOS DE SEGURANÇA

Data de impressão 11/MAR/2008

Data de Actualização. 09/FEB/2006

Cloreto de *N*-metilimidazole

Versão 1.1

Regulamento (CE) N 1907/2006

1. Identificação da Substância/Preparação e da Sociedade/Empresa

Nome do Produto	N-Metilimidazolium chloride
Referência do Produto	40477
Companhia	Sigma-Aldrich Sucursal em Portugal Centro Escritórios Sintra Nascente, A. Alm. Gago Coutinho. P-2710 Sintra
Número de telefone do técnico	351 21 924 25 55
Número de Fax	351 21 924 26 10
Número de Telefone de Emergência	0034 609 14 62 86
Endereço de e-mail	Eutrchserv@sial.com

2. Identificação de Perigos

Indicações especiais de perigos para humanos e para o meio ambiente	Nocivo se deglutido. Irritante para os olhos, sistema respiratório e pele.
--	--

3. Composição/Informação sobre os componentes

Fórmula	C ₄ H ₆ N ₂ .HCl
Peso Molecular	118.56 g/mol
Sinónimos	1-methylimidazole hydrochloride
No. CAS	35487-17-3
No. CE	Nenhum
No. Index	Nenhum
Concentração [%]	-

4. Primeiros Socorros

Após inalação	Se inalado, levar o paciente para o ar fresco. Caso a respiração se torne difícil, chamar um médico.
Após contacto com a pele	Em caso de contacto, lavar a pele imediatamente com sabão e água em abundância.
Após contacto com os olhos	Em caso de contacto com os olhos, lavar com água em abundância por, no mínimo, 15 minutos. Separar as pálpebras com os dedos para garantir uma lavagem adequada. Chamar um médico.
Após ingestão	Se ingerido, lavar a boca com água desde que a pessoa esteja consciente. Chamar um médico.

5. Medidas de Combate a Incêndio

Meios adequados de extinção	Borrifo de água. Dióxido de carbono, pó químico seco ou espuma adequada.
Riscos especiais	Emite vapores tóxicos em situações de incêndio.
Equipamento especial de protecção a utilizar pelo pessoal de combate a incêndio	Utilizar aparelho de respiração autónomo e vestimenta de protecção para impedir o contacto com a pele e com os olhos.

6. Medidas a Tomar em caso de Fugas Acidentais

Medidas de precaução pessoal a seguir em caso de fuga ou derrame	Evacuar a área.
Procedimento (s) de Protecção individual	Usar aparelho de respiração autónoma, botas de borracha e luvas pesadas de borracha.
Métodos de limpeza	Absorver com areia ou vermiculita e colocar em recipientes fechados para ser descartado. Ventilar a área e lavar o local derramado depois de terminar o recolhimento do material.

7. Manuseamento e Armazenagem

Manipulação	Instruções para manipulação em segurança: Não respirar o vapor.
--------------------	---

	Evitar o contacto com os olhos, pele e vestimentas. Evitar a exposição prolongada ou repetida.
Armazenagem	Condições de armazenamento: Manter hermeticamente fechado.

8. Controlo da Exposição/Protecção Pessoal

Controlos Mecânicos	Duche de segurança e lava-olhos. Requer exaustão mecânica.
Medidas de Higiene Geral	Lavar bem após o manuseio.
<u>Protecção Individual</u>	
Protecção Respiratória	Nos casos em que a avaliação de risco mostrar que os respiradores purificadores do ar são apropriados, use um respirador de cobertura facial total com cartuchos de combinação multi-objectivos (E.U.A.) ou do tipo ABEK (EN 14387) como apoio a controlos de engenharia. Se o respirador for o único meio de protecção, usa um respirador de ar de cobertura facial total. Use respiradores e componentes testados e aprovados por normas governamentais apropriadas, tais como as NIOSH (E.U.A.) ou CEN (UE).
Protecção das mãos	Luvas compatíveis resistentes a produtos Químicos.
Protecção dos olhos	Óculos de segurança química.
Protecção do corpo e da pele	Escolher uma protecção para o corpo conforme a quantidade e a concentração das substâncias perigosas no lugar de trabalho.
Medidas de higiene	Manusear de acordo com as boas práticas industriais de higiene e segurança. Lavar as mãos antes de interrupções, e no final do dia de trabalho.

9. Propriedades Físicas e Químicas

Aspecto	Estado Físico: sólido
----------------	-----------------------

pH	4.3, concentração: 100 g/l
Ponto de Fusão	75 °C
Ponto de ebulição	N/A
Ponto de Inflamação	118 °C
Inflamabilidade	N/A
Temperatura de auto-ignição	N/A
Propriedades oxidantes	N/A
Propriedades explosivas	N/A
Limites da explosão	N/A
Pressão de vapor	N/A
Peso específico/densidade	N/A
Coeficiente de partição	Log Kow: < 0.3
Viscosidade	N/A
Densidade de vapor	N/A
Concentração de vapor saturado	N/A
Taxa de evaporação	N/A
Massa Volúmica Aparente	N/A
Temperatura de decomposição	N/A
Conteúdo de Solventes	N/A
Conteúdo em água	N/A
Tensão superficial	N/A
Condutividade	N/A
Dados diversos	N/A
Solubilidade	N/A

10. Estabilidade e Reactividade

Estabilidade	Estável: estável. Produtos a evitar: agentes oxidantes fortes.
Produtos de decomposição perigosos	Produtos de decomposição perigosos: monóxido de carbono, dióxido de carbono.
Polimerização Perigosa	Polimerização perigosa: Não ocorrerá.

11. Informação Toxicológica

Sinais e sintomas de exposição	Até onde sabemos, as propriedades químicas, físicas e toxicológicas não foram minuciosamente investigadas.
Via de exposição	Contacto cutâneo: Absorção cutânea: Contacto ocular: Inalação: Ingestão:
<u>Efeitos potenciais sobre a saúde</u>	
Inalação	Pode ser nocivo se inalado. O material é irritante para as membranas mucosas e para o trato respiratório superior.
Pele	Pode ser nocivo se absorvido através da pele. Provoca irritação cutânea.
Olhos	Provoca irritação nos olhos.
Ingestão	Nocivo se engolido.

12. Informação Ecológica

Nenhum dado disponível.

13. Considerações Relativas à Eliminação

Eliminação da substância	Entrar em contacto com um serviço profissional credenciado de descarte de lixo para descartar esse material. Dissolver ou misturar o material com um solvente combustível e queimar em incinerador químico equipado com pós-combustor e purificador de gases. Observar todos os regulamentos ambientais federais, estaduais e locais.
---------------------------------	---

14. Informações relativas ao Transporte

ADR/RID	Não é perigoso para transporte via rodoviária.
IMDG	Não é perigoso para transporte via marítima.
IATA	Não é perigoso para transporte via aérea.

15. Informação sobre regulamentação

Rotulado de acordo com as directivas da CE	
Símbolos de perigo	Xn, Nocivo

Frase (s) – R	R 22-36/37 Nocivo se deglutido. Irritante para os olhos, sistema respiratório e pele.
Frase (s) – S	S26 Em caso de contacto com os olhos, lavar imediata e abundantemente com água e consultar um especialista.
Informação específica para cada País	
Alemanha	WGK (Classificação Alemã de Perigosidade para o Ambiente Aquático): 3 Self-Classification

16. Outras informações

Garantia	Acredita-se que as informações acima estejam correctas, embora não pretendam ser totalmente abrangentes, devendo ser usadas apenas como um guia. A Sigma-Aldrich não deverá ter responsabilidade legal por quaisquer danos resultantes do manuseio ou do contacto com o produto acima. Consultar o verso da factura ou nota que acompanha o produto para tomar conhecimento dos termos adicionais e condições de venda.
Aviso Legal	Deve ser usado somente para I+D e investigação. Não é apto para fabricação de medicamentos, material de uso doméstico ou outros usos.



Produto

Hidrogénio

Data: 29/06/1999

1. Identificação da Substância/Preparação da Empresa

N° de Ficha de Segurança	067A
Nome do Produto	Hidrogénio
Fórmula Química	H2
Identificação da empresa	Ver em cima ou em baixo na página
Telefones de emergência	Ver em cima ou em baixo na página

2. Composição / Informação sobre os Componentes

Substância/ Preparação	Substância
Componentes / Impurezas	Não contém outros componentes ou impurezas que possam modificar a classificação do produto.
N° CAS	01333-74-0
N° CEE (do EINECS)	215-605-7

3. Identificação de Perigos

Identificação de Perigos	Gás comprimido. Extremamente inflamável
---------------------------------	---

4. Primeiros Socorros

Inalação	Em elevadas concentrações pode causar asfixia. Os sintomas podem incluir perda de conhecimento e motricidade. A vítima pode não ter percepção da asfixia Retirar a vítima da área contaminada utilizando o equipamento de respiração autónoma. Manter a vítima quente e em repouso. Chamar o médico. Aplicar a respiração artificial se a vítima parar de respirar
Ingestão	A ingestão não é considerada como via potencial de exposição.

5. Medidas de Combate a Incêndios

Riscos específicos	A exposição ao fogo pode provocar rotura e/ou explosão dos recipientes.
---------------------------	---

Produtos perigosos da combustão	Nenhum.
Meios de extinção adequados	Podem ser usados todos os agentes de extinção conhecidos.
Métodos específicos	Se possível eliminar a fuga do produto. Afastar-se do recipiente e arrefecê-lo com água protegendo-se atrás de uma parede. Não extinguir uma fuga de gás inflamada a menos que seja absolutamente necessário. Pode-se produzir a re-inflamação espontânea e explosiva. Extinguir os outros fogos.
Equipamento de protecção especial para o combate a incêndios	Em espaços fechados, utilizar o equipamento de respiração autónoma de pressão positiva.

6. Medidas a Tomar em caso de fugas acidentais

Precauções pessoais	Utilizar equipamento de respiração autónoma de pressão positiva quando entrar na área a não ser que se comprove que a atmosfera é respirável. Assegurar adequada ventilação de ar. Evacuar a área. Eliminar as possíveis fontes de ignição.
Precauções ambientais	Tentar eliminar a fuga ou derrame.
Métodos de limpeza	Ventilar a área.

7. Manuseamento e Armazenagem

Manuseamento e Armazenagem	Garantir que o equipamento esteja ligado à terra. Impedir a entrada de água no recipiente. Purgar o ar da instalação antes de introduzir o gás. Não permitir o retorno do produto para o recipiente. Utilizar somente equipamentos com especificação apropriada a este produto e à sua pressão e temperatura de fornecimento. Contactar o seu fornecedor de gás em caso de dúvidas. Manter ao abrigo de toda a fonte de inflamação (incluindo cargas
-----------------------------------	---

	<p>electrostáticas).</p> <p>Separar em armazém os gases oxidantes de outros produtos oxidantes.</p> <p>Seguir as instruções do fornecedor para o manuseamento do recipiente.</p> <p>Colocar o recipiente em local bem ventilado, a temperaturas inferiores a 50°C.</p>
--	--

8. Controlo de Exposição / Protecção Individual

Protecção Individual	<p>Garantir ventilação adequada.</p> <p>Não fumar durante o manuseamento do produto.</p>
-----------------------------	--

9. Propriedades Físicas e Químicas

Peso Molecular	2
Ponto de Fusão	-259 °C
Ponto de Ebulição	-253°C
Temperatura Crítica	-240 °C
Densidade relativa, gás	0.07 (ar=1)
Densidade relativa, líquido	0.07 (água = 1)
Pressão de Vapor, a 20 °C	Não aplicável
Solubilidade na água	1.6 mg/L
Aspecto/ Cor	Gás incolor
Cheiro	Não detectável o cheiro
Temperatura de auto-ignição	560 °C
Gama de inflamabilidade	4 – 75% de volume no ar

10. Estabilidade e Reactividade

Estabilidade e Reactividade	<p>Pode formar uma mistura explosiva com o ar.</p> <p>Pode reagir violentamente com oxidantes.</p>
------------------------------------	--

11. Informação Toxicológica

Generalidades	Produto sem efeitos toxicológicos
----------------------	-----------------------------------

12. Informação Ecológica

Generalidades	Produto sem risco ecológico
----------------------	-----------------------------

13. Questões Relativas à Eliminação

Generalidades	<p>Não descarregar em locais onde haja o perigo potencial de formar uma mistura explosiva com o ar. O gás descarregado deve ser queimado em queimador apropriado, equipado com dispositivo anti-retorno de chama.</p> <p>Não descarregar em locais onde sua acumulação possa ser perigosa.</p> <p>Em caso de necessidade contactar o fornecedor para informações.</p>
----------------------	---

14. Informações Relativas ao Transporte

Designação oficial para transporte	Hidrogénio comprimido
Número ONU	1049
Classe / Divisão	2.1
Número da rubrica ADR / RID	2, 1°F
Nº de perigo ADR / RID	23
Rotulagem ADR	Etiqueta 3: gás inflamável
Outras informações relativas ao transporte	<p>Evitar o transporte em veículos onde o espaço de carga não está separado da cabine de condução.</p> <p>Assegurar que o condutor do veículo conhece os perigos potenciais da carga bem como as medidas a tomar em caso de acidente ou emergência.</p> <p>Antes de transportar os recipientes, verificar que estão bem fixados e:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Comprovar que a válvula está fechada e que não tem fugas - Comprovar que o tampão de saída da válvula (quando existente) está correctamente instalado.

	<ul style="list-style-type: none"> - Comprovar que o dispositivo de protecção da válvula (quando existente) está correctamente instalado. - Garantir ventilação adequada - Cumprir a legislação em vigor
--	---

15. Informação sobre Regulamentação

Número no Anexo I da directiva 67/548	001-001-00-9.
Classificação CEE	F+: R12
Frases de risco	R12 Extremamente inflamável
Frases de segurança	<p>S9 Manter o recipiente em local bem ventilado.</p> <p>S16 Manter afastado de qualquer chama ou fonte de faísca - Não fumar.</p> <p>S33 Evitar acumulação de cargas electrostáticas.</p>

16. Outras Informações

Assegurar que todas as regulamentações nacionais ou locais são respeitadas.

Assegurar que os operadores compreendem bem os riscos da inflamabilidade.

Os riscos de asfixia são frequentemente subestimados e devem ser realçados durante a formação dos operadores.

Antes de utilizar este produto para experiências ou novos processos, examinar atentamente a compatibilidade e segurança dos materiais utilizados.

As informações dadas neste documento são consideradas exactas até ao momento da sua impressão. Embora tenham sido dispensados todos os cuidados na sua elaboração, nenhuma responsabilidade será aceite em caso de danos ou acidentes resultantes da sua utilização.



Produto	Azoto	Data: 29/06/1999
MSDS Nº 067A	Versão 1.17	Substitui versão com data de: 25/08/1994

1. Identificação da Substância/Preparação da Empresa

Nº de Ficha de Segurança	089A
Nome do Produto	Azoto
Fórmula Química	N2
Identificação da Empresa	Ver em cima ou em baixo da página
Telefones de Emergência	Ver em cima ou em baixo da página

2. Composição / Informação sobre os Componentes

Substância/ Preparação	Substância
Componentes / Impurezas	Não contém outros componentes ou impurezas que possam modificar a classificação do produto
Nº CAS	07727-37-9
Nº CEE (do EINECS)	231-783-9

3. Identificação de Perigos

Identificação de Perigos	- Gás comprimido - Riscos de asfixia em altas concentrações
---------------------------------	--

4. Primeiros Socorros

Inalação	Em elevadas concentrações pode causar asfixia. Os sintomas podem incluir perda de conhecimento e motricidade. A vítima pode não ter percepção da asfixia Retirar a vítima da área contaminada utilizando o equipamento de respiração autónoma. Manter a vítima quente e em repouso. Chamar o médico. Aplicar a respiração artificial se a vítima parar de respirar
-----------------	--

5. Medidas de Combate a Incêndios

Riscos específicos	A exposição ao fogo pode provocar rotura e/ou explosão dos recipientes. Não inflamável.
Produtos perigosos da combustão	Nenhum
Meios de extinção	Podem ser usados todos os agentes de extinção

adequados	conhecidos
Métodos específicos	Se possível eliminar a fuga do produto. Afastar-se do recipiente e arrefecê-lo com água protegendo-se atrás de uma parede.
Equipamento de protecção especial para o combate a incêndios	Em espaços fechados, utilizar o equipamento de respiração autónoma de pressão positiva.

6. Medidas a Tomar em caso de fugas acidentais

Precauções pessoais	Utilizar equipamento de respiração autónoma de pressão positiva quando entrar na área a não ser que se comprove que a atmosfera é respirável. Assegurar adequada ventilação de ar. Evacuar a área.
Precauções ambientais	Tentar eliminar a fuga ou derrame.
Métodos de limpeza	Ventilar a área

7. Manuseamento e Armazenagem

Manuseamento e Armazenagem	Impedir a entrada de água no recipiente. Não permitir o retorno do produto para o recipiente. Utilizar somente equipamentos com especificação apropriada a este produto e à sua pressão e temperatura de fornecimento. Contactar o seu fornecedor de gás em caso de dúvidas. Seguir as instruções do fornecedor para o manuseamento do recipiente. Colocar o recipiente em local bem ventilado, a temperaturas inferiores a 50°C.
-----------------------------------	---

8. Controlo de Exposição / Protecção Individual

Protecção Individual	Garantir ventilação adequada.
-----------------------------	-------------------------------

9. Propriedades

Peso Molecular	28
-----------------------	----

Ponto de Fusão	-210 °C
Ponto de Ebulição	-196°C
Temperatura Crítica	-147°C
Densidade relativa, gás	0.97 (ar=1)
Densidade relativa, líquido	Não aplicável
Pressão de Vapor, a 20 °C	Não aplicável
Solubilidade na água	20 mg/L
Aspecto/ Cor	Gás incolor
Cheiro	Não detectável o cheiro

10. Estabilidade e Reactividade

Estabilidade e Reactividade	Estável em condições normais
------------------------------------	------------------------------

11. Informação Toxicológica

Generalidades	Produto sem efeitos toxicológicos
----------------------	-----------------------------------

12. Informação Ecológica

Generalidades	Produto sem risco ecológico
----------------------	-----------------------------

13. Questões Relativas à Eliminação

Generalidades	Não descarregar em locais onde sua acumulação possa ser perigosa Ao ar livre em local bem ventilado Em caso de necessidade contactar o fornecedor para informações
----------------------	--

14. Informações Relativas ao Transporte

Designação oficial para transporte	Azoto comprimido
Número ONU	1066
Classe / Divisão	2.1
Número da rubrica ADR /	2, 1°A

RID	
Nº de perigo ADR / RID	20
Rotulagem ADR	Etiqueta 2: gás não inflamável e não tóxico
Outras informações relativas ao transporte	<p>Evitar o transporte em veículos onde o espaço de carga não está separado da cabine de condução.</p> <p>Assegurar que o condutor do veículo conhece os perigos potenciais da carga bem como as medidas a tomar em caso de acidente ou emergência.</p> <p>Antes de transportar os recipientes, verificar que estão bem fixados e:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Comprovar que a válvula está fechada e que não tem fugas - Comprovar que o tampão de saída da válvula (quando existente) está correctamente instalado. - Comprovar que o dispositivo de protecção da válvula (quando existente) está correctamente instalado. - Garantir ventilação adequada - Cumprir a legislação em vigor

15. Informação sobre Regulamentação

Número no Anexo I da directiva 67/548	Não incluído no Anexo I
Classificação CEE	Não classificada como substância perigosa
Rotulagem CEE (Símbolos, Frases R e S)	Não requer rotulagem CEE

16. Outras Informações

<p>Asfixiante a altas concentrações.</p> <p>Manter o recipiente em local bem ventilado.</p> <p>Não respirar os gases.</p> <p>Assegurar que todas as regulamentações nacionais ou locais são respeitadas</p> <p>Os riscos de asfixia são frequentemente subestimados e devem ser realçados durante a formação dos operadores.</p>
--

Antes de utilizar este produto para experiências ou novos processos, examinar atentamente a compatibilidade e segurança dos materiais utilizados.

As informações dadas neste documento são consideradas exactas até ao momento da sua impressão. Embora tenham sido dispensados todos os cuidados na sua elaboração, nenhuma responsabilidade será aceite em caso de danos ou acidentes resultantes da sua utilização.

Ficha de segurança: Celulose

SIGMA-ALDRICH

Folha de Dados de Segurança do Produto (MSDS)

Data de impressão 10/MAR/2008

Data de Actualização. 13/FEB/2006

Versão 1.3

Regulamento (CE) N 1907/2006



Health	1
Fire	1
Reactivity	0
Personal Protection	B

1. Informação de Produto e de Companhia

Nome do Produto	CELULOSE MICROCRISTALINA EM PÓ
Referência do Produto	435236
Companhia	Sigma-Aldrich Sucursal em Portugal Ctro Escritorios Sintra Nascente, A. Alm. Gago Coutinho. P-2710 Sintra
Número de Telefone do Serviço Técnico	351 21 924 25 55
Número de Fax	351 21 924 26 10
Endereço e-mail	Eurtechserv@sial.com
Número de Telefone de Emergência	0034 609 14 62 86

2. Identificação dos Perigos

INDICAÇÕES ESPECIAIS DE PERIGOS PARA HUMANOS E PARA O MEIO AMBIENTE.

Não perigoso seguindo a directiva 67/548/EC

3. Informação/composição dos ingredientes

Nome do produto	A-CELLULOSE
Número CAS	9004-34-6
Número EC	232-674-9
Número do Índice do Anexo I	Nenhum
Sinónimos	Abicel * beta-Amylose * Arbocel * Arbocel BC 200 * Arbocell B 600/30 * Avicel * Avicel 101 * Avicel 102 * Avicel CL 611 * Avicel PH 101 * Avicel PH 105 * Cellex MX * Cellulose(ACGIH:OSHA) * alpha Cellulose * Cellulose 248 * Cellulose crystalline * Celufi * CEPO * Cepo CFM * CEPO S 20 * CEPO S 40 * Chromedia CC 31 * Chromedia CF 11 * Cupricellulose * Elcema F 150 * Elcema G 250 * Elcema P 050 * Elcema P 100 * Fresenius D 6 * Heweten 10 * Hydroxycellulose * Kingcot * LA 01 * Microcrystalline cellulose * MN-Cellulose *

	Onozuka P 500 * Pyrocellulose * Rayophane * Rayweb Q * Rexcel * Sigmacell * Solka-fil * Solka-floc * Solka-floc BW * Solka-floc BW 20 * Solka-floc BW 100 * Solka-floc BW 200 * Solka- floc BW 2030 * Spartose OM-22 * Sulfite cellulose * Tomofan * Tunicin * Whatman CC-31
--	---

4. Medidas de Primeiros Socorros

Após Inalação	Se inalado, levar o paciente para o ar fresco. Caso a respiração se torne difícil, chamar um médico.
Após contacto com a pele	Em caso de contacto, lavar a pele imediatamente com sabão e água em abundância.
Após contacto com os olhos	Em caso de contacto com os olhos, lavar com água em abundância por, no mínimo, 15 minutos. Separar as pálpebras com os dedos para garantir uma lavagem adequada. Chamar um médico.
Após ingestão	Se ingerido, lavar a boca com água desde que a pessoa esteja consciente. Chamar um médico.

5. Medidas de Combate a Incêndios

Dados sobre a explosão	Poeira potencial: Esse material, como a maioria dos materiais em pó, é capaz de produzir uma explosão de pó.
Condições de flamabilidade	A formação de carga estática pode representar um risco potencial de incêndio quando usado em presença de misturas voláteis ou inflamáveis.
Meios de extinção de fogos	Adequado: Borrifo de água. Dióxido de carbono, pó químico seco ou espuma adequada.
Riscos especiais	Risco (s) específico (s): Emite vapores tóxicos em situações de incêndio.
Equipamento especial para bombeiros	Utilizar aparelho de respiração autónomo e vestimenta de protecção para impedir o contacto com a pele e com os olhos.

6. Medidas no caso de libertação acidental

Medidas de Precaução pessoal a seguir em caso de fuga ou derrame	Usar instrumentos que não produzam faíscas.
Procedimento (s) de Protecção Individual	Tomar as precauções adequadas para minimizar o contacto directo com a pele ou com os olhos e evitar a inalação do pó.
Métodos de Limpeza	Varrer, colocar em um saco e guardar até o seu descarte. Evitar o levantamento de pó. Ventilar a área e lavar o local derramado depois de terminar o recolhimento do material.

7. Manuseamento e Armazenagem

Manuseamento	Instruções para manipulação em segurança: Evitar a inalação. Evitar o contacto com os olhos, pele e vestimentas. Evitar a exposição prolongada ou repetida.
Armazenamento	Condições de armazenamento: Manter hermeticamente fechado.

8. Controlos de exposição/Equipamento de protecção pessoal

Controlos Mecânicos	Duche de segurança e lava-olhos. Requer exaustão mecânica.						
Medidas de Higiene	Lavar bem após o manuseio.						
Limites de Exposição – Suíça	<table><tr><td>Origem</td><td>Tipo</td><td>Valor</td></tr><tr><td>OEL</td><td>OEL</td><td>6 mg/m³</td></tr></table> Observações: A	Origem	Tipo	Valor	OEL	OEL	6 mg/m ³
Origem	Tipo	Valor					
OEL	OEL	6 mg/m ³					
Limites de Exposição – Reino Unido	<table><tr><td>Origem</td><td>Tipo</td><td>Valor</td></tr><tr><td>OEL</td><td>TWA</td><td>(Média) 4mg/m³</td></tr></table> Observações: Pó respirável OEL STEL (Limite) 20 mg/m3 Observações: Poeira total	Origem	Tipo	Valor	OEL	TWA	(Média) 4mg/m ³
Origem	Tipo	Valor					
OEL	TWA	(Média) 4mg/m ³					
Equipamento de Protecção Pessoal	Protecção das Vias Respiratórias. Use respiradores e componentes testados e aprovados pelos padrões governamentais, tais como, NIOSH (US) ou CEN (EU).						

	Protecção para as mãos: Luvas protectoras. Protecção para os olhos: Óculos de segurança química.
--	---

9. Propriedades Físicas e Químicas

Aparência	Estado Físico: Sólido Cor: Branco Forma: Pó
pH	N/A
Ponto de Ebulição	N/A
Ponto de Fusão	N/A
Ponto de Inflamação	N/A
Inflamabilidade	N/A
Temperatura de Auto-ignição	N/A
Propriedades Oxidantes	N/A
Propriedades Explosivas	N/A
Limites de Explosão	N/A
Pressão de vapor	N/A
Peso específico / densidade	0.6 g/cm ³
Coefficiente de partição	N/A
Viscosidade	N/A
Densidade de vapor	N/A
Concentração de vapor saturado	N/A
Taxa de Evaporação	N/A
Massa Volúmica Aparente	N/A
Temperatura de Decomposição	N/A
Conteúdo de Solventes	N/A
Conteúdo em água	N/A
Tensão superficial	N/A
Condutividade	N/A
Dados diversos	N/A
Solubilidade	N/A

10. Estabilidade e Reactividade

Estabilidade Química	Estável: Estável. Produtos a evitar: Agentes oxidantes fortes.
Produtos de Decomposição Perigosos	Produtos de decomposição perigosos: Monóxido de carbono, dióxido de carbono.
Polimerização Perigosa	Não ocorrerá

11. Informação Toxicológica

Número da RTECS	FJ5691460
Efeitos Agudos	<p>-Contacto com a pele: Não irritante (PII=0/8.0) (coelho)</p> <p>-Contacto com os olhos: Não irritante</p> <p>-Inalação: LD₅₀> 5.05 mg/l (4h) (rato). Máxima concentração atingida – mortalidade zero.</p> <p>-Ingestão: LD₅₀: > 5,000 mg/kg (rato)</p>
Sinais e Sintomas de Exposição	Até onde sabemos, as propriedades químicas, físicas e toxicológicas não foram minuciosamente investigadas.
Vias de Exposição	<p>Contacto cutâneo: Pode provocar irritação da pele.</p> <p>Absorção cutânea: Pode ser nocivo se absorvido através da pele.</p> <p>Contacto ocular: Pode provocar irritação nos olhos.</p> <p>Inalação: O material pode ser irritante para as membranas mucosas e para o trato respiratório superior. Pode ser nocivo se inalado.</p> <p>Ingestão: Pode ser nocivo se deglutido.</p>

12. Informação Ecológica

Nenhum dado disponível.

13. Informações para a eliminação dos resíduos

<p>Entrar em contacto com um serviço profissional credenciado de descarte de lixo para descartar esse material. Dissolver ou misturar o material com um solvente combustível e queimar em incinerador químico equipado com pós-combustor e purificador de gases. Observar todos os regulamentos ambientais federais, estaduais e locais.</p>
--

14. Informações Relativas ao Transporte

RID/ADR	Não é perigoso para transporte rodoviário.
IMG	Não é perigoso para transporte marítimo.
IATA	Não é perigoso para transporte aéreo.

15. Informação sobre Regulamentação

Não perigoso seguindo a directiva 67/548/EC
INFORMAÇÃO ESPECÍFICA PARA CADA PAÍS
Alemanha
WGK (Classificação Alemã de Perigosidade para o Ambiente Aquático): 1
ID-Number: 5291
Classificação de acordo com o apêndice 3.

16. Outras Informações

Garantia	Acredita-se que as informações acima estejam correctas, embora não pretendam ser totalmente abrangentes, devendo ser usadas apenas como um guia. A Sigma não deverá ter responsabilidade legal por quaisquer danos resultantes do manuseio ou do contacto com o produto acima. Consultar o verso da factura ou nota que acompanha o produto para tomar conhecimento dos termos adicionais e condições de venda. Direitos exclusivos, 2007, da Sigma-Aldrich Co. Permissão concedida para fazer número ilimitado de cópias em papel, somente para uso interno.
Aviso Legal	Deve ser usado somente para I+D e investigação. Não é apto para fabricação de medicamentos, material de uso doméstico ou outros usos.

1. Informação de Produto e de Companhia

Nome do Produto	Ácido Clorídrico
Referência do Produto	339253
Marca	<i>Sigma-Aldrich</i>
Companhia	<i>Sigma-Aldrich</i> Química SA Apt Correos 161 P-2810 ALCOBENDAS-MADRID
Número de Telefone do Serviço Técnico	+351 1-661-9977
Número de Fax	+351 1-661-9642
Número de Telefone de Emergência	+34 609 146286

2. Identificação dos Componentes

Fórmula	HCl
Nº CAS	7647-01-0
Nº CE	231-595-7
No. Index	017-002-01-X
Classificação	C, R34-R37
Concentração [%]	37

3. Identificação dos Perigos

Efeitos adversos à Saúde Humana	A inalação causa irritações severas nas vias respiratórias. Pode causar edema pulmonar. O contacto com a pele causa queimaduras, podendo levar a dermatites. O contacto prolongado do ácido leva ao dano visual até à perda da visão. Se ingerido, pode causar queimaduras nas mucosas da boca e no sistema digestivo.
Efeitos Ambientais	Afecta rios e cursos de água alterando o pH da água. Possíveis contaminações do solo. A emissão de vapores pode afectar temporariamente a qualidade do ar.

Perigos Físicos e Químicos	Reage com metais, tais como: ferro, alumínio, zinco, magnésio,... formando hidrogénio, que misturado com o ar pode provocar explosões e deslocamento do ar em caso de ignição em condições específicas.
Mais importantes	O vapor produzido é irritante. Pode causar queimaduras graves na pele, olhos e mucosas.

4. Medidas de Primeiros Socorros

Recomendação geral	Retirar a vítima da área contaminada. Retirar a roupa e os sapatos contaminados. Consultar um médico.
Inalação	Retirar a vítima da área contaminada para uma zona ventilada. Aplicar a respiração artificial se a vítima não respirar. Consultar um médico.
Contacto com a pele	Retirar imediatamente a roupa e os sapatos contaminados. Lavar a zona contaminada com água. Consultar um médico.
Contacto com os olhos	Lavar imediatamente os olhos com água, durante pelo menos quinze minutos, e consultar o médico.
Ingestão	Não provocar vômitos. Dar à vítima grandes quantidades de água. Enxaguar a boca com água. Consultar um médico.

5. Medidas de Combate a Incêndios

Meios de extinção adequados	Podem ser usados todos os agentes de extinção conhecidos.
Equipamento de protecção especial para o combate a incêndios	Usar equipamento de respiração autónoma de pressão positiva e roupa de protecção química.
Informação complementar	Não inflamável. A exposição ao fogo pode provocar rotura e/ou explosão dos recipientes.

6. Medidas no caso de fugas acidentais

Precauções individuais	Evacuar a área. Usar equipamento de respiração autónoma de pressão positiva e roupa de protecção química. Assegurar ventilação adequada de ar.
Precauções ambientais	Tentar eliminar a fuga ou derrame. Impedir a entrada do produto no sistema de esgotos. Reduzir o vapor com água em forma de névoa (pulverizada) ou tipo chuveiro fino.
Métodos de limpeza	Ventilar a área. Lavar a área afectada com água. Lavar abundantemente com água o equipamento e a zona contaminada.

7. Manuseamento e Armazenagem

Manuseamento	Evitar a inalação do vapor ou da névoa.
Armazenamento	Impedir a entrada de água no recipiente. Armazenar em local fresco. Guardar o recipiente hermeticamente fechado em lugar seco e bem ventilado. Os contentores abertos devem ser cuidadosamente fechados de novo.

8. Controlo de exposição/Protecção individual

Equipamento de Protecção Pessoal	Protecção das Vias Respiratórias. Nos casos em que a avaliação de risco mostrar que os respiradores purificadores do ar são apropriados, usar um respirador de cobertura facial total com cartuchos de combinação multi-objectivos (E.U.A.) ou do tipo ABEK (EN 14387) como apoio a controlos de engenharia. Protecção para as mãos: Manusear com luvas. As luvas de protecção seleccionadas devem satisfazer as especificações da Directiva da UE 89/689/CEE e o standard EN 374 derivado dele. Protecção para os olhos: Óculos de segurança química. Medidas Especiais de Protecção: Escolher uma protecção para o corpo conforme a quantidade e a concentração das substâncias perigosas no lugar de trabalho.
Medidas de higiene	Manusear de acordo com as boas práticas de higiene e segurança industriais. Lavar as mãos sempre após o seu manuseamento.

9. Propriedades Físicas e Químicas

Aparência	Estado Físico: Líquido Cor: incolor a amarelo claro Odor: pungente, irritante e acre
pH	-
Ponto de Ebulição	48 °C (solução a 38% de HCl)
Ponto de Fusão	- 26 °C (solução a 38% de HCl)
Inflamabilidade	Não inflamável
Pressão de vapor	227 hPa, 21.1 °C 547 hPa, 37.7 °C
Viscosidade	2.3 mPa, 15 °C
Densidade de vapor	1,15 g/cm ³
Solubilidade em água	Completa

10. Estabilidade e Reactividade

Estabilidade em armazenamento	Estável sob as condições recomendadas de armazenamento.
Matérias a evitar	Bases, Aminas, Metais alcalinos, Metais, Permanganatos, por exemplo, permanganato de potássio, Flúor, acetilídios metálicos, dissiliceto de hexalítio.
Produtos perigosos de decomposição formados durante os incêndios	Cloreto de hidrogénio gasoso.

11. Informação Toxicológica

Toxicidade Aguda	Inalação Bronquite, edema pulmonar e dermatoses. Pele Queimaduras, cicatrização difícil, dermatoses. Olhos Danos da córnea. Ingestão Queda de pressão e perfuração do estômago e esófago.
Efeitos potenciais sobre a saúde	Inalação Tosse, cefaleias e tonturas. Pele Queimaduras e dor forte e constante.

	<p>Olhos Queimaduras nos olhos.</p> <p>Ingestão Dor intensa devido a queimadura na boca, faringe e abdómen. Vômito e diarreia escura.</p>
--	---

12. Informação Ecológica

Efeitos ambientais	Fugas de ácido clorídrico podem provocar uma redução de pH num sistema com baixa fonte de carbonos e de outros compostos neutralizadores de ocorrência natural. Conter o líquido com terra para não atingir rios e os sistemas de esgotos, evitar a emissão de materiais voláteis para a atmosfera.
---------------------------	---

13. Informações para a eliminação dos resíduos

Produto Observar todos os regulamentos ambientais federais, estaduais e locais. Entrar em contacto com um serviço profissional credenciado de descarga de lixo para descartar esse material.

Embalagens contaminadas Eliminar como produto Não utilizado.

14. Informações Relativas ao Transporte

RID/ADR	<p>Número da UN: 1789</p> <p>Classe: 8</p> <p>PG: II</p> <p>Nome Adequado para Embarque: hydrochloric acid</p>
IMG	<p>Número da UN: 1789</p> <p>Classe: 8</p> <p>PG: II</p> <p>Nome Adequado para Embarque: hydrochloric acid</p>
IATA	<p>Número da UN: 1789</p> <p>Classe: 8</p> <p>PG: II</p> <p>Nome Adequado para Embarque: hydrochloric acid</p>

15. Informação sobre Regulamentação

Rotulado de acordo com as directivas da CE

Rotulagem CE

Símbolos de perigo

C Corrosivo

Frase(s) - R

R34 Provoca queimaduras.

R37 Irritante para as vias respiratórias.

Frase(s) - S

S26 Em caso de contacto com os olhos lavar imediata e abundantemente com água e consultar um especialista.

S45 Em caso de acidente ou de indisposição consultar imediatamente o médico (se possível mostrar-lhe o rótulo).

Componentes determinadores de perigo para o rótulo:

7647-01-0 Hydrochloric acid

16. Outras Informações

Texto das frases R mencionadas na Secção 2

R34 Provoca queimaduras.

R37 Irritante para as vias respiratórias.

Informação complementar

Direitos exclusivos, 2007, da Sigma-Aldrich. Permissão concedida para fazer número ilimitado de cópias em papel, somente para uso interno.

Acredita-se que as informações acima estejam correctas, embora não pretendam ser totalmente abrangentes, devendo ser usadas apenas como um guia. A Sigma-Aldrich não deverá ter responsabilidade legal por quaisquer danos resultantes do manuseio ou do contanto com o produto acima. Consultar o verso da factura ou nota que acompanha o produto para tomar conhecimento dos termos adicionais e condições de venda.

1. Informação de Produto e de Companhia

Nome do Produto	1-Metilimidazol
Referência do Produto	M50834
Marca	<i>Sigma-Aldrich</i>
Companhia	<i>Sigma-Aldrich</i> Química SA Apt Correos 161 P-2810 ALCOBENDAS-MADRID
Telefone	+351 1-661-9977
Número de Fax	+351 1-661-9642
Número de Telefone de Emergência	+34 609 146286
Endereço de e-mail	eutrchserv@sial.com

2. Identificação dos Componentes

Fórmula	C ₄ H ₆ N ₂
Peso Molecular	82.11 g/mol
No. CAS	616-47-7
No. CE	210-484-7
No. Index	613-035-00-7
Classificação	C, R21/22 – R34
Concentração [%]	-

3. Identificação de Perigos

Aparência	Líquido amarelo a incolor.
Efeitos adversos à Saúde Humana	Provoca queimaduras dos olhos e da pele. Causa queimaduras do tracto digestivo e respiratório. Prejudicial se absorvido pela pele. Combustível líquido e vapor.

4. Primeiros Socorros

Recomendação geral	Consultar um médico.
--------------------	----------------------

Inalação	Se inalado, levar a pessoa para o ar fresco. Se não respirar, aplicar a respiração artificial. Consultar um médico.
Contacto com a pele	Retirar imediatamente a roupa e os sapatos contaminados. Lavar a zona contaminada com água. Consultar um médico.
Contacto com os olhos	Lavar imediatamente os olhos com água, durante pelo menos quinze minutos, e consultar o médico.
Ingestão	Não provocar vômitos. Dar à vítima grandes quantidades de água. Enxaguar a boca com água. Consultar um médico.

5. Medidas de Combate a Incêndio

Meios de extinção adequados	Utilizar água pulverizada, espuma resistente ao álcool, produto químico seco ou dióxido de carbono.
Equipamento especial de protecção a utilizar pelo pessoal de combate a incêndio	Usar equipamento de respiração autónomo para combate a incêndios, se necessário.

6. Medidas no caso de fugas acidentais

Precauções Individuais	Usar equipamento de protecção individual. Evitar a respiração do vapor/névoa/gás. Assegurar ventilação adequada. Evacuar o pessoal para áreas de segurança.
Precauções ambientais	Não permitir a entrada do produto no sistema de esgotos.
Métodos de limpeza	Embeber em material inerte e absorvente e tratar como desperdício especial. Manter em recipientes fechados adequados, para eliminação.

7. Manuseamento e Armazenagem

Manuseamento	Evitar o contacto com a pele e os olhos. Evitar a inalação do vapor ou da névoa. Manter afastado de qualquer chama ou fonte de ignição – Não fumar. Tomar medidas para impedir a formação de electricidade estática.
Armazenagem	Armazenar em local fresco. Guardar o recipiente hermeticamente fechado

	em lugar seco e bem ventilado. Os contentores abertos devem ser cuidadosamente fechados de novo e têm que ficar direitos para evitar a dispersão. Manejar sob azoto, proteger da humidade. Armazenar sob nitrogénio.
--	--

8. Controlo de exposição/Protecção individual

Protecção Individual	
Protecção Respiratória	Nos casos em que a avaliação de risco mostrar que os respiradores purificadores do ar são apropriados, usar um de cobertura facial total com cartuchos de combinação multi-objectivos (E.U.A.) ou do tipo ABEK (EN 14387) como apoio a controlos de engenharia.
Protecção das mãos	Manusear o produto com luvas. As luvas de protecção seleccionadas devem satisfazer as especificações da Directiva da UE 89/689/CEE e o estandarte EN 374 derivado dele.
Protecção dos olhos	Óculos de segurança.
Protecção do corpo e da pele	Escolher uma protecção para o corpo conforme a quantidade e a concentração das substâncias perigosas no lugar de trabalho.
Medidas de higiene	Manusear de acordo com as boas práticas industriais de higiene e segurança. Lavar as mãos antes de interrupções, e no final do dia de trabalho.

9. Propriedades Físicas e Químicas

Aspecto	Estado Físico: líquido, claro Cor: incolor
pH	9.5 – 11.5 a 100g/l a 20 °C
Ponto de Fusão	-60 °C
Ponto de ebulição	197 – 199 °C
Ponto de Inflamação	92 °C – câmara fechada
Temperatura de ignição	525 °C
Limites de explosão, inferior	2.7 % (V)
Limites de explosão, superior	15.7 % (V)

Pressão de vapor	0.5 hPa a 20 °C
Densidade	1.035 g/cm ³
Hidrosolubilidade	Dados não disponíveis

10. Estabilidade e Reactividade

Estabilidade em armazenamento	Estável sob as condições recomendadas de armazenamento.
Condição a evitar	Exposição à humidade.
Matérias a evitar	Dióxido de carbono (CO ₂), agentes oxidantes fortes.
Produtos de decomposição perigosos	Produtos de decomposição formados durante incêndios: óxidos de carbono, óxidos de azoto (NO _x).

11. Informação Toxicológica

Toxicidade aguda	Irritação nos olhos, corrosivo e não letal.
Irritação ou corrosão	Grave irritação da pele. Grave irritação dos olhos.
Sensibilização	Dados não disponíveis
Exposição Crónica	Dados não disponíveis
Efeitos potenciais sobre a saúde	
Inalação	Pode ser perigoso se inalado. O material é extremamente destrutivo para os tecidos das membranas mucosas e do trato respiratório superior.
Pele	Queimaduras na pele.
Olhos	Queimaduras nos olhos.
Ingestão	Nocivo por ingestão. Provoca queimaduras.

12. Informação Ecológica

Efeitos ambientais	Pode ser nocivo para os organismos aquáticos devido à mudança do pH.
---------------------------	--

13. Considerações Relativas à Eliminação

Produto	Este material deve ser queimado num incinerador químico equipado com um pós-combustor e purificador de gases. Observar todos os regulamentos ambientais federais, estaduais e locais. Entrar em contacto com um serviço profissional credenciado de descarga de lixo para descartar este material.
Embalagens Contaminadas	Eliminar como produto Não utilizado.

14. Informações relativas ao Transporte

ADR/RID	No. ONU: 3267 Classe: 8 Grupo de embalagem: II Denominação de expedição correcta: CORROSIVE LIQUID, BASIC, ORGANIC, N.O.S. (1-Methylimidazole)
IMDG	No. ONU: 3267 Classe: 8 Grupo de embalagem: II SEM – No: F – A, S – B Denominação de expedição correcta: CORROSIVE LIQUID, BASIC, ORGANIC, N.O.S. (1-Methylimidazole) Poluente Marinho: Não
IATA	No. ONU: 3267 Classe: 8 Grupo de embalagem: II Denominação de expedição correcta: CORROSIVE LIQUID, BASIC, ORGANIC, N.O.S. (1-Methylimidazole)

15. Informação sobre Regulamentação

Rotulado de acordo com as directivas da CE	
Símbolos de perigo	C, corrosivo
Frase (s) – R	R21/22 Nocivo em contacto com a pele e por ingestão.

	R34 Provoca queimaduras.
Frase (s) – S	S26 Em caso de contacto com os olhos, lavar imediata e abundantemente com água e consultar um especialista. S36 Usar vestuário de protecção adequado. S45 Em caso de acidente ou de indisposição consultar imediatamente o médico (se possível mostrar-lhe o rótulo).

16. Outras informações


Direitos exclusivos, 2007, da *Sigma-Aldrich*. Permissão concedida para fazer número ilimitado de cópias em papel, somente para uso interno.

Acredita-se que as informações acima estejam correctas, embora não pretendam ser totalmente abrangentes, devendo ser usadas apenas como um guia. A *Sigma-Aldrich* não deverá ter responsabilidade legal por quaisquer danos resultantes do manuseio ou do contacto com o produto acima. Consultar o verso da factura ou nota que acompanha o produto para tomar conhecimento dos termos adicionais e condições de venda.



Éter Isopropílico	MF n.º 109 Rev. 01: Novembro/2008
-------------------	--------------------------------------

INFORMAÇÕES INICIAIS

Sinônimos	Diisopropil éter, óxido diisopropil, 2-isopropóxiopropano.		Fórmula	$C_6H_{14}O$
Descrição	Líquido incolor de odor doce; flutua e mistura lentamente com água.			
N.º da ONU	1159	Classificação e Simbologia de Risco	 Inflamável	Avaliação Sumária de Riscos
Utilização e Acondicionamento na EEL	Labs. de Ensino e Pesquisa do DEQUI e DEMAR: Sínteses Análises Acondicionamento: Frascos de vidro âmbar de 1 litro.			

PROPRIEDADES FÍSICAS

Ponto de Fusão: - 60°C	Pressão de Vapor: 119 mmHg	Densidade do Vapor: 3,5
Ponto de Ebulição: 69°C	Massa Específica: 0,7 g/cm ³	Solubilidade: 1,2g/100mL de água.

INCÊNDIO, EXPLOSÃO, DESASTRE

Ponto de Fulgor	- 17°C	Temperatura de Auto Ignição	443°C	Limites de Explosividade	1,4 – 7,9 %
RISCO DE INCÊNDIO	Alto. Líquido altamente inflamável.				
RISCO DE EXPLOSÃO	Alto. As misturas da substância com o ar são explosivas.				
RISCO DE DESASTRE	Alto. Seu vapor é mais denso que o ar e pode se estender pelo solo, possibilitando uma ignição num ponto distante.				
COMBATE A INCÊNDIO	Usar água pulverizada, AFFF, espuma de álcool, pó químico seco ou gás carbônico.				

REATIVIDADE

ESTABILIDADE	Estável.	POLIMERIZAÇÃO PERIGOSA	Não ocorre.
INCOMPATIBILIDADE	Oxidantes fortes e ácidos.		
PRODUTOS PERIGOSOS DA DECOMPOSIÇÃO	Monóxido e dióxido de carbono.		
REAÇÕES PERIGOSAS	—		

Uso Restrito à EEL
FL 01/02

TOXIDEX – RISCO À SAÚDE

LIMITES DE TOLERÂNCIA	EC	310 ppm - 1300 mg/m ³	DL ₅₀	8470 mg/kg (rato-oral)
	EL	250 ppm - 1040 mg/m ³		
EXPOSIÇÃO	RISCO	EFEITOS		
INALAÇÃO	Mod.	Causa náusea, dor de cabeça e vômito. Em altas concentrações pode afetar o sistema nervoso central ou levar a morte.		
CONTATO-OLHOS	Baixo	Causa vermelhidão.		
CONTATO-PELE	Baixo	Causa vermelhidão.		
INGESTÃO	Mod.	Pode causar problemas digestivos, náuseas ou vômito.		

PROCEDIMENTOS DE PRIMEIROS SOCORROS

INALAÇÃO	Remover para local arejado. Se respirar com dificuldade, ministrar oxigênio. Se cessar a respiração, aplicar método de reanimação cardiopulmonar.
CONTATO-OLHOS	Lavar imediatamente com muita água por, pelo menos, 15 minutos.
CONTATO-PELE	Lavar imediatamente com muita água até que toda a substância seja removida da pele.
INGESTÃO	Não provocar vômito e fazer com que beba água.

EQUIPAMENTOS DE PROTEÇÃO INDIVIDUAL

PROTEÇÃO RESPIRATÓRIA	Máscara respiratória específica para VO	PROTEÇÃO DOS OLHOS	Oculos de segurança.
PROTEÇÃO DAS MÃOS	Luvas de neoprene ou PVC	OUTROS	Avental de laboratório de manga comprida.

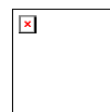
MANUSEIO E ARMAZENAGEM

Manter o recipiente fechado em local ventilado.
 Usar local com ventilação adequada.
 Manter afastado de calor, faíscas e chamas expostas.

PROCEDIMENTO EM DERRAMES - VAZAMENTOS



Usar equipamento de proteção individual apropriado.
 Ficar contra o vento e usar neblina d'água para baixar o vapor.
 Absorver em material apropriado como areia ou outro similar.
 Não usar quaisquer fontes de ignição.

Uso Restrito à EEL.



Furfural	MF n.º 091 Rev. 00: Dezembro/2003
-----------------	--------------------------------------

INFORMAÇÕES INICIAIS

Sinônimos		2-Furaldeído, 2-Furancarboxialdeído		Fórmula	C ₅ H ₄ O ₂
Descrição		Líquido amarelado de odor característico.			
N.º da ONU	1199	Classificação e Simbologia de Risco	 Inflamável	Avaliação Sumária de Riscos	
Utilização e Acondicionamento na FAENQUIL		Labs. de Ensino e Pesquisa do DEBIQ, DEQUI e DEMAR: Sínteses Análises Acondicionamento: Frascos de vidro âmbar de 1 litro.			

PROPRIEDADES FÍSICAS

Ponto de Fusão: -36,5°C	Pressão de Vapor: 2 mmHg	Densidade do Vapor: 3,31
Ponto de Ebulição: 162°C	Massa Específica: 1,16 g/cm ³	Solubilidade: 8% solúvel em água.

INCÊNDIO, EXPLOÇÃO, DESASTRE

Ponto de Fulgor	60°C	Temperatura de Auto Ignição	315°C	Limites de Explosividade	2,1-19,3%
RISCO DE INCÊNDIO	Moderado. Líquido de inflamabilidade média.				
RISCO DE EXPLOÇÃO	Moderado. Acima de 60°C pode formar misturas explosivas com o ar.				
RISCO DE DESASTRE	Moderado. Seu vapor é mais denso que o ar.				
COMBATE A INCÊNDIO	Pó químico seco, espuma de álcool, água pulverizada e gás carbônico.				

REATIVIDADE

ESTABILIDADE	Estável.	POLIMERIZAÇÃO PERIGOSA	Ocorre.
INCOMPATIBILIDADE	Ácidos fortes, agentes oxidantes, alcalinos fortes. Pode se polimerizar em contato com ácidos fortes e alcalinos fortes.		
PRODUTOS PERIGOSOS DA DECOMPOSIÇÃO	Monóxido e dióxido de carbono.		
REAÇÕES PERIGOSAS	—		

Uso Restrito à FAENQUIL
FL 01/02

TOXIDEZ –RISCO À SAUDE

LIMITES DE TOLERÂNCIA	EC	—	DL ₅₀	65 mg/kg (rato-oral)
	EL	2 ppm – 7,9 mg/m ³		
EXPOSIÇÃO	RISCO	EFEITOS		
INALAÇÃO	Alto	Causa tosse, dor de cabeça, dificuldade respiratória e dor de garganta.		
CONTATO-OLHOS	Mod.	Causa vermelhidão e dor. Pode ser absorvida pela pele.		
CONTATO-PELE	Mod.	Causa vermelhidão e dor.		
INGESTÃO	Mod.	Causa dores abdominais, diarreia, dor de cabeça, dor de garganta e vômito.		

PROCEDIMENTOS DE PRIMEIROS SOCORROS

INALAÇÃO	Remover para local arejado. Se respirar com dificuldade, ministrar oxigênio. Se cessar a respiração, aplicar respiração boca a boca.
CONTATO-OLHOS	Lavar imediatamente em água corrente por, pelo menos, 15 minutos.
CONTATO-PELE	Lavar imediatamente em água corrente até que toda a substância seja removida da pele.
INGESTÃO	Se estiver consciente provocar vômito e fazer com que beba água.

EQUIPAMENTOS DE PROTEÇÃO INDIVIDUAL

PROTEÇÃO RESPIRATÓRIA	Máscara respiratória específica para vapores orgânicos.	PROTEÇÃO DOS OLHOS	Óculos de segurança.
PROTEÇÃO DAS MÃOS	Luvas de PVC ou similares.	OUTROS	Avental de laboratório de manga comprida.

MANUSEIO E ARMAZENAGEM

Usar lugar fresco, bem ventilado e protegido do sol. Dispor os resíduos em recipientes especiais, próprios para conter substâncias inflamáveis. Manter o recipiente fechado e devidamente etiquetado. Manter afastado de componentes incompatíveis.
--

PROCEDIMENTO EM DERRAMES - VAZAMENTOS



Conter o vazamento. Eliminar fontes de ignição. Ventilar o local. Absorver em areia ou outro material não combustível. Lavar o local com água. Consultar o GSMT em caso de derrames/vazamentos maiores.
--

Uso Restrito à FAENQUIL.



Álcool Furfurílico	MF n.º 097 Rev. 01: Novembro/2008
--------------------	--------------------------------------

INFORMAÇÕES INICIAIS

Sinônimos	2-Furilmetanol, 2-Furilcarbinol.			Fórmula	C ₅ H ₆ O ₂
Descrição	Líquido incolor com odor característico.				
N.º da ONU	2874	Classificação e Simbologia de Risco	 Tóxico	Avaliação Sumária de Riscos	
Utilização e Acondicionamento na EEL	Labs. de Ensino e Pesquisa do DEQUI e DEMAR: Sínteses Análises Acondicionamento: Frascos de plástico com até 1 Kg / 1 litro.				

PROPRIEDADES FÍSICAS

Ponto de Fusão: -14,6 a -31°C	Pressão de Vapor: 0,6mmHg	Densidade do Vapor: 3,4
Ponto de Ebulição: 170°C	Massa Específica: 1,13 g/cm ³	Solubilidade: Miscível em água.

INCÊNDIO, EXPLOSÃO, DESASTRE

Ponto de Fulgor	75°C	Temperatura de Auto Ignição	490°C	Limites de Explosividade	1,8 – 16,3%
RISCO DE INCÊNDIO	Moderado. Líquido combustível.				
RISCO DE EXPLOSÃO	Moderado. Acima de 75°C pode formar misturas explosivas com o ar.				
RISCO DE DESASTRE	Moderado, em caso de grandes vazamentos.				
COMBATE A INCÊNDIO	Usar pó químico seco, espuma de álcool, gás carbônico ou água pulverizada.				

REATIVIDADE

ESTABILIDADE	Estável.	POLIMERIZAÇÃO PERIGOSA	Ocorre.
INCOMPATIBILIDADE	Oxidantes fortes e ácidos. Em contato com ácidos orgânicos pode ocorrer polimerização perigosa.		
PRODUTOS PERIGOSOS DA DECOMPOSIÇÃO	Monóxido e dióxido de carbono.		
REAÇÕES PERIGOSAS	Ocorrem com oxidantes fortes e ácidos.		

Uso Restrito à EEL
FL 01/02

TOXIDEX –RISCO À SAUDE

LIMITES DE TOLERÂNCIA	EC	15 ppm - 60 mg/m³	DL ₅₀	400 mg/kg (rato)
	EL	10 ppm - 40 mg/m³		
EXPOSIÇÃO	RISCO	EFEITOS		
INALAÇÃO	Mod.	Causa tosse, enjôo e dores de garganta.		
CONTATO-OLHOS	Mod.	Causa vermelhidão, dor e embaçamento na visão.		
CONTATO-PELE	Alto	Causa ressecamento e vermelhidão. Pode ser absorvido pela pele.		
INGESTÃO	Alto	Causa tosse, enjôo, dores de garganta e perda de consciência.		

PROCEDIMENTOS DE PRIMEIROS SOCORROS

INALAÇÃO	Remover para local arejado. Se respirar com dificuldade, ministrar oxigênio. Se cessar a respiração, aplicar método de reanimação cardiopulmonar.
CONTATO-OLHOS	Lavar imediatamente com muita água por, pelo menos, 15 minutos.
CONTATO-PELE	Lavar imediatamente com muita água até que toda a substância seja removida da pele.
INGESTÃO	Se a pessoa estiver consciente, induzir ao vômito.

EQUIPAMENTOS DE PROTEÇÃO INDIVIDUAL

PROTEÇÃO RESPIRATÓRIA	Máscara Respiratória com Cartucho para VO.	PROTEÇÃO DOS OLHOS	Óculos de segurança.
PROTEÇÃO DAS MÃOS	Luvas de látex ou similares.	OUTROS	Avental de laboratório de manga comprida.

MANUSEIO E ARMAZENAGEM

Usar local com ventilação adequada.
 Manter afastado de calor, faíscas e chamas expostas.
 Isolar de substâncias incompatíveis.

PROCEDIMENTO EM DERRAMES - VAZAMENTOS

Conter o vazamento.
 Absorver em areia ou outro material similar.
 Ventilar o local.
 Consultar o GSMT em caso de derrames/vazamentos maiores.

Uso Restrito à EEL.




UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Escola de Engenharia de Lorena - EEL



Éter Isopropílico	MF n.º 109 Rev. 01: Novembro/2008
-------------------	--------------------------------------

INFORMAÇÕES INICIAIS

Sinônimos	Diisopropil éter, óxido diisopropil, 2-isopropóxiopropano.		Fórmula	C ₆ H ₁₄ O
Descrição	Líquido incolor de odor doce; flutua e mistura lentamente com água.			
N.º da ONU	1159	Classificação e Simbologia de Risco	 Inflamável	Avaliação Sumária de Riscos
Utilização e Acondicionamento na EEL	Labs. de Ensino e Pesquisa do DEQUI e DEMAR: Sínteses Análises Acondicionamento: Frascos de vidro âmbar de 1 litro.			

PROPRIEDADES FÍSICAS

Ponto de Fusão: - 60°C	Pressão de Vapor: 119 mmHg	Densidade do Vapor: 3,5
Ponto de Ebulição: 69°C	Massa Específica: 0,7 g/cm ³	Solubilidade: 1,2g/100mL de água.

INCÊNDIO, EXPLOÇÃO, DESASTRE

Ponto de Fulgor	- 17°C	Temperatura de Auto Ignição	443°C	Limites de Explosividade	1,4 – 7,9 %
RISCO DE INCÊNDIO	Alto. Líquido altamente inflamável.				
RISCO DE EXPLOÇÃO	Alto. As misturas da substância com o ar são explosivas.				
RISCO DE DESASTRE	Alto. Seu vapor é mais denso que o ar e pode se estender pelo solo, possibilitando uma ignição num ponto distante.				
COMBATE A INCÊNDIO	Usar água pulverizada, AFFF, espuma de álcool, pó químico seco ou gás carbônico.				

REATIVIDADE

ESTABILIDADE	Estável.	POLIMERIZAÇÃO PERIGOSA	Não ocorre.
INCOMPATIBILIDADE	Oxidantes fortes e ácidos.		
PRODUTOS PERIGOSOS DA DECOMPOSIÇÃO	Monóxido e dióxido de carbono.		
REAÇÕES PERIGOSAS	—		

Uso Restrito à EEL
FL 01/02

TOXIDEZ – RISCO À SAÚDE

LIMITES DE TOLERÂNCIA	EC	310 ppm - 1300 mg/m ³	DL ₅₀	8470 mg/kg (rato-oral)
	EL	250 ppm - 1040 mg/m ³		
EXPOSIÇÃO	RISCO	EFEITOS		
INALAÇÃO	Mod.	Causa náusea, dor de cabeça e vômito. Em altas concentrações pode afetar o sistema nervoso central ou levar a morte.		
CONTATO-OLHOS	Baixo	Causa vermelhidão.		
CONTATO-PELE	Baixo	Causa vermelhidão.		
INGESTÃO	Mod.	Pode causar problemas digestivos, náuseas ou vômito.		

PROCEDIMENTOS DE PRIMEIROS SOCORROS

INALAÇÃO	Remover para local arejado. Se respirar com dificuldade, ministrar oxigênio. Se cessar a respiração, aplicar método de reanimação cardiopulmonar.
CONTATO-OLHOS	Lavar imediatamente com muita água por, pelo menos, 15 minutos.
CONTATO-PELE	Lavar imediatamente com muita água até que toda a substância seja removida da pele.
INGESTÃO	Não provocar vômito e fazer com que beba água.

EQUIPAMENTOS DE PROTEÇÃO INDIVIDUAL

PROTEÇÃO RESPIRATÓRIA	Máscara respiratória específica para VO	PROTEÇÃO DOS OLHOS	Óculos de segurança.
PROTEÇÃO DAS MÃOS	Luvas de neoprene ou PVC	OUTROS	Avental de laboratório de manga comprida.

MANUSEIO E ARMAZENAGEM

Manter o recipiente fechado em local ventilado. Usar local com ventilação adequada. Manter afastado de calor, faíscas e chamas expostas.
--

PROCEDIMENTO EM DERRAMES - VAZAMENTOS

Usar equipamento de proteção individual apropriado. Ficar contra o vento e usar neblina d'água para baixar o vapor. Absorver em material apropriado como areia ou outro similar. Não usar quaisquer fontes de ignição.

Uso Restrito à EEL.

10. Referências Bibliográficas

- [1] Rosillo-Calle F., Groot P., Hemstock, S., "The Biomass Assessment Handbook- Bioenergy for a Sustainable Environment", Earthscan, USA, 2007.
- [2] Swatloski R., Rogers R., "Dissolution and processing of cellulose using ionic liquids", University of Alabama, patent nr US 6,824,599 B2, USA, 2004.
- [3] "Heterogeneous Catalysis: Principles and Applications", Oxford University Press, 1987.
- [4] Queiroga F., Ferreira L., "Estudo da hidrólise da celulose obtida a partir de resíduos lignocelulósicos do bagaço de cana", Centro Universitário da FEI, Brasil.
- [5] Urquiaga S., Alves B., "Produção de biocombustíveis: a questão do balanço energético", Embrapa Agrobiologia, Ano XIV - Nº 1 - Jan./Fev./Mar. 2005.
- [6] Changzhi Li, Qian Wang, Zongbao K. Zhao, "Acid in ionic liquid: An efficient system for hydrolysis of lignocelluloses", The Royal Society of Chemistry: Green Chem., 2008, 10, 177–182.
- [7] D. L. Klass, "Biomass for Renewable Energy, Fuels and Chemicals", Academic Press, New York, USA, 1998.
- [8] Ames J., Bailey R., Mann J., "Analysis of Furanone, Pyranone, and New Heterocyclic Colored Compounds from Sugar-Glycine Model Maillard Systems", Journal of Agriculture and Food Chemistry, 1999, Vol. 47, No. 2.
- [9] Fukuoka A., Dhepe P., "Catalytic Conversion of Cellulose into Sugar Alcohols", Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 5161–5163.
- [10] "Saccharification of lignocellulosic materials", Pure & Appl., Vol. 55, No. 4, pp. 705–720, 1983.
- [11] "BP Statistical Review of World Energy June 2007", UK, 2007.
- [12] Tyrlik S., Szerszen D., Olejnik M., Danikiewicz W., "Selective dehydration of glucose to hydroxymethylfurfural and a one-pot synthesis of a 4-acetylbutyrolactone from glucose and trioxane in solutions of aluminium salts", Carbohydrate Research 315 (1999) 268–272.
- [13] Moreau C., Belgacemb M., Gandini A., "Recent catalytic advances in the chemistry of substituted furans from carbohydrates and in the ensuing polymers", Topics in Catalysis Vol. 27, Nos. 1–4, February 2004.
- [14] Shengdong Zhu, Yuanxin Wu, "Dissolution of cellulose with ionic liquids and its application: a mini-review", Green Chem., 2006, Vol. 8, 325–327.
- [15] Hapiot P., Lagrost C., "Electrochemical Reactivity in Room-Temperature Ionic Liquids", American Chemical Society, 2008.

- [16] Hata S. “*Disruption of plant material to readily hydrolysable cellulosic particles*”, PCT WO 02/057317 A1, 2002
- [17] Moreau C., Finiels A., Vanoye L., “*Dehydration of fructose and sucrose into 5-hydroxymethylfurfural in the presence of 1-H-3-methyl imidazolium chloride acting both as solvent and catalyst*”, Journal of Molecular Catalysis A: Chemical 253 (2006) 165–169.
- [18] Huber G., Iborra S., Corma A., “*Synthesis of Transportation Fuels from Biomass: Chemistry, Catalysts, and Engineering*”, Chem. Rev. 2006, Vol. 106, 4044-4098.
- [19] Earle M. J., Seddon K. “*Ionic liquids: Green solvents for the future*”, Pure Appl. Chem., Vol. 72, No. 7, pp. 1391–1398, 2000.
- [20] Jackson S., Canning A., Vass E., Watson S., “*Carbon Laydown Associated with Furan Hydrogenation over Palladium/Zirconia*”, Ind. Eng. Chem. Res. 2003, 42, 5489-5494.
- [21] Bicker M., Hirth J., Vogel H., “*Dehydration of fructose to 5-hydroxymethylfurfural in suband supercritical acetone*”, The Royal Society of Chemistry 2003.
- [22] Watanabe M., Aizawa Y., “*Glucose reactions with acid and base catalysts in hot compressed water at 473 K*”, Carbohydrate Research 340 (2005) 1925–1930.
- [23] Moreau C., Durand R., “*Isomerization of glucose into fructose in the presence of cation-exchanged zeolites and hydrotalcites*”, Applied Catalysis A: General 193 (2000) 257–264.
- [24] Lourvanij K., Rorrer G., “*Reaction Rates for the Partial Dehydration of Glucose to Organic Acids in Solid-Acid, Molecular-Sieving Catalyst Powders*”, Journal of Chemical Technology and Biotechnology. 1997, Vol. 69, 35-44.
- [25] Leshkov Y., Barrett C., “*Production of dimethylfuran for liquid fuels from biomass-derived carbohydrates*”, Nature, Vol. 447, 21 June 2007.
- [26] Li Feng, Zhong-lan Chen, “*Research progress on dissolution and functional modification of cellulose in ionic liquids*”, Journal of Molecular Liquids, 2008.
- [27] Murugesan S., Linhardt R., “*Ionic Liquids in Carbohydrate Chemistry – Current Trends and Future Directions*”, Current Organic Synthesis, 2005, 2, 437-451.
- [28] Dua S., O'Hair R., “*The Negative Ion Mass Spectra of Deprotonated Carbohydrates. Part I. The Basic Hydroxymethyl-substituted Ring Systems*”, Journal of Chemical Society Perkin trans. 2 1992.
- [29] Lewis R., Tanner R., “*Indirect or direct fermentation of biomass to fuel alcohol*”, US 2007/0275447 A1.
- [30] Preat J., Jacquemin D., “*TD-DFT Investigation of the UV Spectra of Pyranone Derivatives*”, Journal of Physics and Chemistry. A, 2006, Vol. 110, 8144-8150.

- [31] Suqin Hu, Zhaofu Zhang, “*Conversion of fructose to 5-hydroxymethylfurfural using ionic liquids prepared from renewable materials*”, The Royal Society of Chemistry: Green Chemistry, 2008.
- [32] Holbrey J.D., Seddon K.R., “*Ionic liquids*”, Springer-Verlag 1999, Clean Products and Processes, Vol.1, 223–236.
- [33] Jerábek K., Setínek K., “*Method of separation of furfural from diluted aqueous solutions*”, USP 5,0110611, April 1991.
- [34] Barros Soares L., Alves B., “*Balanço Energético na produção de Bioetanol de Mandioca*”, Embrapa Agrobiologia, Rio de Janeiro, 2008.
- [35] Dumitriu S., “*Polysaccharides: Structural Diversity and Functional Versatility*”, Marcel Dekker, USA, 1998.
- [36] Décio G., “*Balanço energético das culturas de soja e girassol para produção de biodiesel*”, Universidade Estadual de Londrina, Brasil, 2005.
- [37] Sprouse, J. F; Hansen, D. L. “*Sprouse collection of infrared spectra. Book I: Polymers*” Sprouse Scientific Systems Inc.: Pennsylvania, 1987.
- [38] “*The Polymerization of Furfuryl Alcohol with p-toluenesulfonic Acid: Photocross-Linkable Feature of the Polymer*”, Polímeros vol.10 n.1 São Carlos Jan./Mar. 2000
- [39] Binder J., Raines R., “*Simple chemical transformation of lignocellulosic biomass into furans for fuels and chemicals*”, Journal of the American Chemical Society, Washington, Janeiro 2009.